

**Differentielle Wirkungsquerschnitte
für die Coulomb-Ionisation der K-Schale
von Aluminium und Kohlenstoff**

Karl-Heinz Weber

1976

Differentielle Wirkungsquerschnitte für die Coulomb-Ionisation
der K-Schale von Aluminium und Kohlenstoff

Inaugural - Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Karl-Heinz Weber



München

1976

1. Berichterstatter: Prof. Dr. F. Bell

2. Berichterstatter: Prof. Dr. J. Peisl

Tag der mündlichen Prüfung: 29. Juli 1976



Inhaltsverzeichnis

	Seite
<u>1. Einleitung</u>	1
<u>2. Meßmethode</u>	5
2.1. Experimentelle Zielgrößen	5
2.2. Prinzip der experimentellen Anordnung	6
2.3. Ergänzende Messungen	8
<u>3. Grundlagen für Experiment und Auswertung</u>	11
3.1. Kriterien für die Zeitspektroskopie	11
3.2. Streuwinkel und Stoßparameter	13
<u>4. Aufbau und Funktion der Meßapparatur</u>	17
4.1. Übersicht	17
4.2. Detektoren	19
4.3. Strahlführung	24
4.4. Streufolien	26
4.5. Zählwirkungsgrad des schnellen Röntgen- Detektors	28
4.6. Der elektronische Meßteil	34
<u>5. Auswertung der Meßdaten</u>	38
5.1. Koinzidenzspektren	38
5.2. Fluoreszenzausbeuten und integrale Wir- kungsquerschnitte für Röntgen-Emission	39
5.3. Untersuchung inelastischer Einzelstreuung in Folien-Streuexperimenten	45
5.4. Ionisationswahrscheinlichkeiten	50
5.5. Meßfehler	54

	Seite
<u>6. Theorie</u>	55
6.1. Übersicht	55
6.2. Die semiklassische Näherung für konstante Projektilgeschwindigkeit	60
6.3. Die klassische Zweierstoß-Näherung im Ortsraum	67
<u>7. Vergleich theoretischer und experimenteller Ionisationswahrscheinlichkeiten</u>	71
7.1. K-Ionisation von Aluminium	71
7.1.1. Datenvergleich	
7.1.2. Coulomb-Abstoßung und-Retardierung	74
7.1.3. Bindungseffekt	76
7.2. K-Ionisation von Kohlenstoff	84
7.2.1. Gegenüberstellung der Daten	84
7.2.2. Sekundäreffekte	87
7.2.3. Diskussion	91
<u>8. Zusammenfassung</u>	98
<u>Literaturverzeichnis</u>	99

1. Einleitung

In Stößen atomarer Teilchen können Elektronenlücken in inneren Schalen erzeugt werden. Als Reaktionskanäle sind dabei Anregungen in gebundene Zustände des Targetatoms, in gebundene Zustände des Projektilatoms (Ladungsaustausch) und ins Kontinuum jeweils beider Stoßpartner denkbar. Für den weiteren Sprachgebrauch seien diese Möglichkeiten in den Begriff "Ionisation einer Elektronenschale" gefaßt. Im Rahmen dieser Arbeit beschränken wir uns dabei auf die Ionisation der K-Schale des Targetatoms.

Zur qualitativen Beurteilung der reaktionsbestimmenden Mechanismen ist es nützlich, die Stöße nach zwei Kenngrößen zu kategorisieren: einmal dem Verhältnis Z_1/Z_2 der Kernladungszahlen von Projektil und Target und zum anderen dem Verhältnis V/v_K ihrer Relativgeschwindigkeit V zur mittleren Elektronengeschwindigkeit v_K in der K-Schale.

Im Grenzfall starker Asymmetrie ($Z_1/Z_2 \ll 1$) wird die Ionisation ausgelöst durch die Coulomb-Wechselwirkung der Kernladung des Projektils mit den atomaren Elektronenzuständen des Targets (direkte Coulomb-Ionisation).

In adiabatischen Stößen ($V/v_K \ll 1$) ist Ionisation nach diesem Mechanismus von sehr geringer Wahrscheinlichkeit. Bei Stoßsystemen nahe der Symmetrie ($Z_1/Z_2 = 1$) entsteht jedoch aus der Formierung von Molekülorbitalen im Stoß eine verbesserte Basis für die Induzierung von Übergängen. Für genügende internukleare Annäherung können die Energielagen von Elektronen in diesen Molekülorbitalen in die Nähe unbesetzter Niveaus angehoben werden oder diese kreuzen (electron promotion). Aus derart erleichterten Übergängen verbleiben nach dem Auseinanderlaufen der Stoßpartner Elektronenlücken. Die Besetzung der Molekülorbitale wird bei komplexen Systemen durch das Pauli-Prinzip geregelt; man spricht dann von Pauli-Ionisation^{/1/}.

Die beiden geschilderten Grenzsituationen spalten das Feld theoretischer Beschreibung der Ionisation innerer Schalen in Theorien, die ein detailliertes Studium von Molekülorbitalen

zur Grundlage haben ^{/2/} und solche, die Übergänge zwischen rein atomaren Zuständen betrachten. Die erste Gruppe sei hier als MO-Theorie (Molecular Orbits) bezeichnet. Der zweiten Gruppe gehören Standardmethoden der Streutheorie an, wie die Bornsche Näherung und wie die semiklassische Störungsrechnung, in der die Kernbewegung klassisch behandelt wird. Da für $(Z_1/Z_2) \ll 1$ das Coulomb-Feld des Projektils eine kleine Störung darstellt, werden allgemein die Näherungen erster Ordnung benutzt ^{/3-6,7/}.

Im weiteren werden die in der Literatur eingeführten Abkürzungen PWBA (Plane Wave Born Approximation) für die erste Bornsche Näherung und SCA (Semi Classical Approximation) für die semiklassische Näherung verwendet. Abbildung 1 zeigt eine von Madison und Merzbacher ^{/8/} gegebene Abschätzung der Gültigkeitsbereiche der genannten Theorien in den Parametern Z_1/Z_2 und V/v_K . Die schraffiert eingezeichneten Gültigkeitsbereiche werden getrennt durch eine Zone, in der von Coulomb-Ionisation gesprochen werden kann, in der aber eine Mischung charakteristischer Züge beider Grenzfälle zu erwarten ist.

Diese Arbeit stellt sich die Aufgabe, in dieser Übergangszone neue experimentelle Information zu sammeln und daran theoretische Methoden zu prüfen. Die dazu gewählte Konstellation ist in das Diagramm eingezeichnet. Sie entspricht Protonen von Energien zwischen 100 keV und 240 keV als Projektilen und Aluminium- und Kohlenstoffatomen als Targets. Die Zielsetzung ist es dabei, in Form differentieller Messungen (hinsichtlich des Streuwinkels bzw. Stoßparameters) Detailkenntnisse über die protoneninduzierte Ionisation der K-Schale zu gewinnen.

Die Entwicklung der theoretischen Vorstellungen für Stoßsysteme der MO-Region wurde durch differentielle Messungen dieser Art angeregt ^{/9-11/}. Modifikationen des theoretischen Bildes der Coulomb-Ionisation zur Ausweitung der einfachen PWBA- und SCA-Rechnungen über die in Abbildung 1 gegebenen Grenzen hinaus ^{/7,12/} konnten lange Zeit nur im pauschalen Vergleich mit integralen experimentellen Ionisationsquerschnitten getestet werden ^{/13/}. Seit 1972 stehen Messungen zur Stoßparameterabhängigkeit der

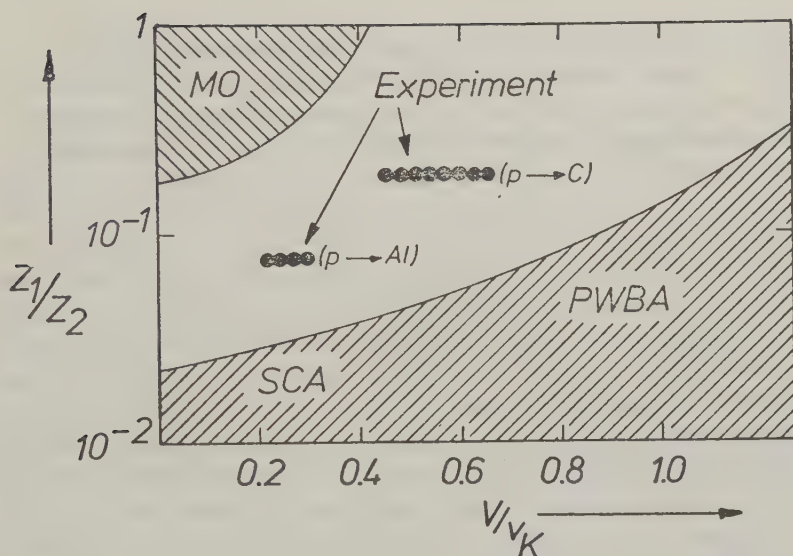


Abb. 1: Lokalisierung des Experiments im Diagramm der Parameter Z_1/Z_2 und V/V_K . Die Gültigkeitsbereiche gegenständlicher Näherungen: der MO-Theorie einerseits und der PWBA und SCA andererseits, sind, nach Madison und Merzbacher^{/8/}, als schraffierte Zonen angegeben.

Coulomb-Ionisation der K-Schale zur Verfügung ^{/14,15/}, zunächst für $(Z_1/Z_2) \ll 1$. Neuere Arbeiten ^{/16-19/} gehen, durch Verwendung von Schwerionen als Projektilen, zu höheren (Z_1/Z_2) -Verhältnissen über. Für die protoneninduzierte Coulomb-Ionisation von Targets niedriger Kernladungszahl fehlen Experimente, die Aufschluß über die Struktur des differentiellen Ionisationsquerschnitts geben.

Neben der allgemeinen Bedeutung als Vergleichsbasis theoretischer Ergebnisse haben experimentelle Daten zur Stoßpara-

meterabhängigkeit der Coulomb-Ionisation eine Anwendung in Untersuchungen von Effekten anisotroper Streuung /20,21/. Solche Effekte (channeling, blocking) treten an Einkristallen und an Oberflächen auf und werden anhand stoßparameterabhängiger Reaktionen, wie der Coulomb-Ionisation, nachgewiesen.

2. Meßmethode

2.1. Experimentelle Zielgrößen

Experimentelle Aufgabe ist die Untersuchung der von Protonen gegebener Energie E in binären Stößen induzierten Ionisation der K-Schale in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ . Das Schema des Prozesses ist in Abbildung 2 skizziert. Die K-Schale des Targetatoms ist hier durch Andeutung ihrer Ladungsverteilung um den Kern der Ladungszahl Z_2 symbolisiert. Die Streuung des Protons ist für den klassischen Grenzfall eingezeichnet, in dem Streuwinkel Θ und Stoßparameter p über eine Bahnkurve eindeutig korreliert sind. (Kriterien zur Gültigkeit der klassischen Näherung folgen in 3.2). Neben der primären Abgabe eines Elektrons aus der K-Schale ist in Abb. 2 die Abstrahlung eines charakteristischen Röntgen-Quants dargestellt, die einer Ionisation mit der Wahrscheinlichkeit ω (Fluoreszenzausbeute) folgt.

Zielgröße der Messungen ist die Ionisationswahrscheinlichkeit w^I im Elementarprozess. Als Indikator der Ionisation wird die charakteristische Röntgen-Emission herangezogen, so daß die eigentliche Meßgröße die Wahrscheinlichkeit für Röntgen-Emission $w^R = \omega w^I$ ist. Setzt man die Kenntnis des totalen differentiellen Streuquerschnitts $d\sigma^S$ voraus, der in sehr guter Näherung durch den elastischen differentiellen Streuquerschnitt ersetzt werden kann, so stellt w^I eine dem differentiellen Ionisationsquerschnitt $d\sigma^I$ äquivalente Größe dar:

$$d\sigma^I = w^I d\sigma^S$$

(Die Übereinstimmung von totalem und elastischem differentiellen Streuquerschnitt folgt aus $d\sigma^I/d\sigma^S \ll 1$ und aus der Vernachlässigbarkeit des inelastischen gegenüber dem elastischen Impulsübertrag bei der Streuung - siehe 6.1.). Aus der Messung ergibt sich w^I als Funktion von Streuwinkel und Primärenergie:

$$w^I = w^I(\theta, E).$$

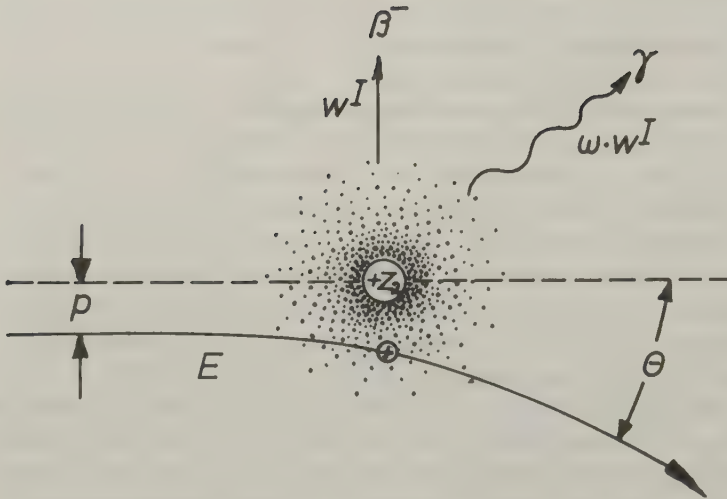


Abb. 2: Schema der Coulomb-Ionisation durch ein klassisch gestreutes Proton.

Das im allgemeinen für den Vergleich mit Theorien benötigte Endresultat aber ist die Stoßparameterverteilung der Ionisationswahrscheinlichkeit bei konstanter Energie:

$$w^I(p) := w^I(\theta(p), E) / E = \text{const.} .$$

Die Transformationsformel $\theta = \theta(p)$ wird in 3.2 angegeben.

2.2. Prinzip der experimentellen Anordnung

Die experimentelle Anordnung hat drei Aufgaben zu erfüllen: einmal binäre Streuung zu realisieren, zum anderen deren Winkelverteilung zu analysieren und schließlich innerhalb der gemessenen Ausschnitte aus der Streuverteilung den inelastischen

Anteil (inelastisch sei hier stets im Sinne einer K-Schalen-Ionisation verstanden) festzustellen.

Abbildung 3 veranschaulicht das Prinzip der gewählten Methode. Ein monoenergetischer Protonenstrahl, in der Skizze gekennzeichnet durch n , wird an einer Targetfolie gestreut. n ist die Gesamtzahl der in der Meßzeit einfallenden Teilchen. Ein Detektor weist die Anzahl n_s der in ein kleines Winkelintervall um den Meßwinkel θ gestreuten Protonen nach.

Binäre Streuung wird näherungsweise verwirklicht durch Verwendung von Streufolien, die genügend dünn gehalten sind, so daß die gewünschten Meßwinkel in das Gebiet der Einzelstreuung fallen (Quantitative Kriterien dazu werden in 5.3 angegeben). Gleichzeitig ist zu fordern, daß der Energieverlust in der Folie klein gegen die Primärenergie ist.

Für die allgemeine Markierung inelastischer Streueignisse steht die gemessene Röntgen-Emission n_{γ} zur Verfügung. Der spezifischen Streuung in das Meßwinkelintervall gehört davon ein Anteil $n_{s\gamma}$ an. Zur Aussonderung dieses Anteils wird die Koinzidenzmethode angewandt. Man erhält $n_{s\gamma}$ als Ausbeute an Proton-Photon-Koinzidenzen. Ist nun ω_{eff} die Wahrscheinlichkeit dafür, ein vorliegendes Ionisationsereignis über den Nachweis eines Röntgen-Quants im Röntgen-Detektor zu registrieren, so ist die Ionisationswahrscheinlichkeit gegeben durch

$$w^I(\theta, E) = \frac{1}{\omega_{\text{eff}}} \frac{n_{s\gamma}}{n_s} .$$

In ω_{eff} geht die Fluoreszenzausbeute ω , die Nachweisempfindlichkeit des Röntgen-Detektors ϵ_{γ} , die Transmission σ seines Fensters und sein Raumwinkel Ω_{γ} ein. Da Isotropie der Röntgen-Emission vorausgesetzt werden darf [22,23], ergibt sich

$$\omega_{\text{eff}} = \omega \sigma \epsilon_{\gamma} \frac{\Omega_{\gamma}}{4\pi} .$$

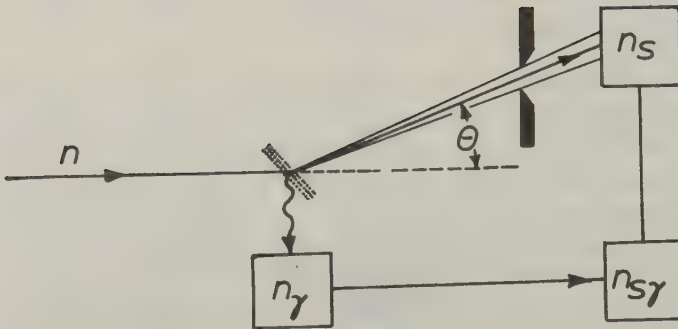


Abb. 3: Prinzip des Proton-Photon-Koinzidenzexperimentes.

2.3. Ergänzende Messungen

Wie später erörtert wird (siehe 5.2.), können im speziellen Fall von Kohlenstoff gemessene Fluoreszenzausbeuten ω drastisch von experimentellen Parametern abhängen. Die Literaturangaben für ω streuen dementsprechend stark (Faktor 4). Es ist deshalb nicht möglich, einen geeigneten Wert aus der Literatur zu übernehmen.

Das hier angewandte Verfahren ist es, ω aus den integralen Wirkungsquerschnitten σ^A und σ^R für protoneninduzierte Auger- und Röntgen-Emission für jede experimentelle Situation zu bestimmen:

$$\omega = \frac{\sigma^R(E)}{\sigma^R(E) + \sigma^A(E)}$$

Die oben angedeuteten Komplikationen liegen dabei ausschließlich auf der Seite der Röntgen-Emission (siehe dazu wiederum 5.2.), so daß $\sigma^A(E)$ anderen experimentellen Arbeiten ^{/24/} entnommen werden kann.

Zur Messung von σ^R wird ein weiterer Protonendetektor eingesetzt, der die Rückstreuung nahe 180° registriert. Da der Einfluß von Kernkräften auf die Streuung von Protonen an Kohlenstoff erst bei Energien $\gtrsim 300$ keV spürbar wird^{/25/}, kann hier die Rückstreuung durch den (auf den Detektorraumwinkel bezogenen) Rutherford-Streuquerschnitt σ^R beschrieben werden. Mit dem berechneten Wert für $\sigma^R(E)$, den Zählausbeuten n_Y und n_R für die Röntgen-Emission und die Rückstreuung sowie den apparativen Daten $\varepsilon_Y, \Omega_Y, \delta, \varepsilon_R$ (Zählwirkungsgrad des Rückstreudetektors) ist σ^R festgelegt:

$$\sigma^R(E) = \sigma^R(E) \frac{\varepsilon_R}{\varepsilon_Y \delta \Omega_Y / 4\pi} (n_Y / n_R).$$

Für Elemente niederer Kernladungszahl ist $\sigma^R \ll \sigma^A$. Die Fluoreszenzausbeute ω läßt sich daher in der Näherung

$$\omega \cong (\sigma^R / \sigma^A)$$

in die Formel für ω_{eff} einführen. In diesem Fall verbleibt im Ergebnis als einzige Apparatekonstante der Zählwirkungsgrad des Rückstreudetektors:

$$\omega_{\text{eff}} = \varepsilon_R (\sigma^R / \sigma^A) (n_Y / n_R).$$

Die Rückstreuung wird energiedispersiv aufgezeichnet. Das Spektrum ist bestimmt durch den massenabhängigen elastischen Energieverlust und so für eine Massenanalyse des Targets geeignet.

Fremdatome im Target verfälschen nicht nur die gemessene Rückstreausbeute n_R , sondern auch die als Normierungsgröße in die Bestimmung der Ionisationswahrscheinlichkeit eingehende Streuausbeute n_S (vergl. 2.2). Eine Targetanalyse ermöglicht die Beseitigung dieser Fehler. Dadurch kann die Einhaltung hoher Reinheitsgrade, die für die extrem dünnen Targetfolien, insbesondere bei Aluminium (Oxydation), mit erheblichem experimentellen Aufwand verbunden wäre, umgangen werden.

Um sichere Aussagen über den Einfluß der Vielfachstreuung auf die Koinzidenzstreuung machen zu können, wird die Meßanordnung so ausgelegt, daß das Gebiet der Vielfachstreuung vollständig (bis zum Streuwinkel 0°) ausgemessen werden kann. Als Intensitätsnormal für diese Messung steht wiederum die Ausbeute an Rückstreuprotonen zur Verfügung.

3. Grundlagen für Experiment und Auswertung

3.1. Kriterien für die Zeitspektroskopie

Die Koinzidenzmessung ist vorgesehen als Spektroskopie der Zeitintervalle zwischen den Zählereignissen im Röntgen-Detektor und den geeignet verzögerten Zählereignissen im Protonendetektor (siehe 4.6.). Für unkorreliert ablaufende Ereignisraten (n_p/T) und (n_s/T) hat in diesem Fall das Zeitspektrum nach der Meßzeit T die Form

$$\left. \frac{dn_{sp}}{dt} \right|_{\text{stat.}} = T (n_p/T) (n_s/T) e^{-(n_s/T)t}.$$

Koinzidenzen n_{sp} sind, angenähert gaußverteilt, einem solchen Untergrund aufgesetzt. Die volle Halbwertsbreite 2τ dieser aufgesetzten Verteilung ist das Standardmaß für die gesamte Zeitunschärfe des Systems. Als Zufallskoinzidenzen n_o definieren wir die statistischen Ereignisse im Intervall 3τ :

$$n_o = \int_{3\tau} (dn_{sp}/dt) \Big|_{\text{stat.}} dt$$

Nimmt man die Koinzidenzrate klein gegen die unkorrelierten Raten und außerdem $(n_s/T)3\tau \ll 1$ an, so wird

$$n_o \cong n_s n_p 3\tau/T.$$

Das Verhältnis der echten zu den zufälligen Koinzidenzen ist bei gegebenen physikalischen und apparativen Daten

$$(n_{sp}/n_o) = \frac{n_s \omega_{\text{eff}} \omega^T}{n_s n_p (3\tau/T)} \propto \frac{1}{(n/T)}$$

also durch den primären Protonenstrom steuerbar.

Der statistische Fehler Δn_{sp} der Koinzidenzausbeute läßt sich, bei Vernachlässigung des Fehlers des extrapolierten Mittelwertes für die Untergrundsubtraktion, abschätzen durch

$$\Delta n_{sy} = \sqrt{n_{sy} + n_o}$$

Bei vorgegebenem $\Delta n_{sy}/n_s$ und n_{sy}/n_o entscheidet der notwendige Meßzeitaufwand T über die Durchführbarkeit des Koinzidenzexperiments. Als Kenngröße für Qualität und Durchführbarkeit des Experiments definieren wir

$$q := \frac{1 + (n_{sy}/n_o)}{(\Delta n_{sy}/n_{sy})^2 T} = \frac{n_{sr}}{n_r} \frac{1}{3\tau} \omega_{eff} \omega^I.$$

Mit Hilfe der Beziehungen

$$\omega_{eff} = \omega \mathcal{E}_r (\Omega_r/4\pi)$$

und

$$(n_{sy}/n_r) = (\sigma^s/\sigma^r) \mathcal{E}_s \omega \omega^I$$

(σ^s ist der Wirkungsquerschnitt für die Streuung in das Winkelintervall $\Delta\theta$, $\mathcal{E}_s$ der Zählwirkungsgrad des Protonendetektors) läßt sich q als Produkt $q = q_p q_A$ schreiben, mit

$$q_p = (\sigma^s/\sigma^r) (\omega \omega^I)^2$$

und

$$q_A = \mathcal{E}_s \mathcal{E}_r \mathcal{J}(\Omega_r/4\pi) (1/3\tau).$$

Der Faktor q_p ist, bei gegebener Winkelauflösung $\Delta\theta/\theta$, durch die physikalischen Gegebenheiten festgelegt; q_A beschreibt die apparativen Erfordernisse zur Erfüllung der Qualitätsnorm q. Für den Nachweis der Streuung in das Winkelintervall $\Delta\theta$ ist dabei bereits optimale Zählgeometrie vorausgesetzt.

Bei der Festsetzung von q ist es sinnvoll, $(n_{sy}/n_o) \gtrsim 1$ zu fordern, da kleinere Werte keine wesentliche Reduzierung von q erbringen. Limitieren wir ferner den statistischen Fehler mit 10 % und die Meßzeit mit 5 h, so wird

$$q \gtrsim 10^{-2} \text{ s}^{-1}.$$

Eine aus theoretischen Vorstellungen gewonnene grobe Prognose für q_p führt, unter Zugrundelegung einer Unschärfe in der Winkelmessung von $(\Delta\theta/\theta) = 0.1$, auf die Größenordnung 10^{-7} und damit auf die Forderung

$$q_A \gtrsim 10^5 \text{ s}^{-1}.$$

In 4.2 wird gezeigt, daß diese Bedingung erfüllt werden kann, wenn im Nachweis der weichen Röntgenstrahlung gegenüber gebräuchlichen Methoden (Zählrohr, Si(Li)-Detektor) eine Verbesserung der Zeitauflösung um etwa zwei Größenordnungen erreicht wird.

3.2. Streuwinkel und Stoßparameter

Für die Überführung der experimentell ermittelten Streugesetze in Stoßparameterverteilungen wird die Transformationsrelation $\Theta = \theta(p)$ benötigt. Da wir im Bereich kleiner Streuwinkel ($\lesssim 10^\circ$) arbeiten, kann die Impulsnäherung ^{/21/} herangezogen werden. Wir gehen dabei von rein elastischer Streuung aus (vergleiche 6.1). Die gestreuten Teilchen sind Protonen mit Energien um 200 keV: es kann deshalb nichtrelativistisch gerechnet werden ($E = 200 \text{ keV}$ entspricht einem Verhältnis der Projektilgeschwindigkeit zur Lichtgeschwindigkeit von $V/c = 0.02$). Der Streuwinkel im Schwerpunktsystem ist dann gegeben durch:

$$\Phi(p) = -\frac{1}{2E} \frac{M_1 + M_2}{M_2} \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{p^2 + z^2}) dz.$$

M_1 und M_2 sind dabei die Massen von Proton und Targetatom, V ist das Wechselwirkungspotential der Stoßpartner.

Bei kleinen Streuwinkeln und zugleich kleinem Massenverhältnis des Projektils zum Target, ergibt sich für den Streuwinkel im Laborsystem, in sehr guter Näherung:

$$\theta = \arctg \left(\frac{\sin \Phi}{\cos \Phi + (M_1/M_2)} \right) \cong \frac{M_1}{M_1 + M_2} \Phi$$

(Für $\theta = 15^\circ$ und $(M_1/M_2) = (1/12)$ entsteht dabei ein Fehler kleiner 1 %). Im Laborsystem ist also

$$\theta(p) \cong - \frac{1}{2E} \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{p^2 + z^2}) dz.$$

Als Wechselwirkungspotential benutzen wir das Thomas-Fermi-Potential ^{/27/} in der Molièreschen Näherung ^{/28/}:

$$V(r) = \frac{Z_2 e^2}{r} \left(0.1 e^{-6r/a_{TF}} + 0.55 e^{-1.2r/a_{TF}} + 0.35 e^{-0.3r/a_{TF}} \right),$$

r ist der Äquipotentialradius, $Z_2 e_0$ die Kernladung des Streuers, a_{TF} ist der Thomas-Fermi-Radius:

$$a_{TF} = 0.885 a_0 Z_2^{-1/3},$$

a_0 ist der Bohrsche Radius: $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$. Es ergibt sich dann:

$$\theta(p) \cong \frac{Z_2 e^2}{E} \frac{1}{a_{TF}} \left[0.6 K_1(6p/a_{TF}) + 0.66 K_1(1.2p/a_{TF}) + 0.105 K_1(0.3p/a_{TF}) \right],$$

K_1 ist die modifizierte Besselfunktion erster Ordnung. Im Bereich von $(p/a_{TF}) \lesssim 1.5$ kann der Term in der eckigen Klammer bei einem Fehler $< 1 \%$ durch

$$\frac{1.01}{p/a_{TF}} e^{-0.5 p/a_{TF}}$$

ersetzt werden ^{/29/}. Die Messungen beschränken sich auf Stoßparameter $p \lesssim (a_{TF}/3)$.

Die Impulsnäherung entspricht dem ersten Glied einer Reihenentwicklung der exakten Formulierung ^{/26/}. Aus dem Verlauf dieser Entwicklung bis zum dritten Glied haben Varelas und

Sizmann^{/29/} Grenzwinkel für vorgegebene Fehler berechnet:
 der Grenzwinkel einprozentiger Genauigkeit bei 200 keV Pro-
 tonen und streuenden Atomen mit Kernladungszahlen um 10 liegt
 bei etwa 15° .

Bei einer Verknüpfung $\theta = \theta(p)$ von Stoßparameter und Streu-
 winkel muß beachtet werden, daß diese Größen einer quanten-
 mechanischen Unschärferelation unterliegen. Für Kleinwinkel-
 streuung gilt ^{/26/}:

$$\delta p \cdot \delta \theta \gtrsim (\hbar/2)$$

($\hbar$ ist die reduzierte de Broglie-Wellenlänge des gestreuten Teilchens). Eine Stoßparameterunschärfe δp transformiert sich dann nicht nur auf das Winkelintervall $|d\theta/dp| \delta p$, sondern bedingt eine darüber hinausgehende Winkelunschärfe^{/30/}

$$\Delta \theta \gtrsim \left[\left(\frac{\hbar}{2\delta p} \right)^2 + \left(\frac{d\theta}{dp} \delta p \right)^2 \right]^{1/2}$$

Für $(\delta p)^2 = (\hbar/2) |d\theta/dp|^{-1}$ wird $\Delta \theta$ zum Minimum $\Delta \theta_{\text{Min}}$. Die quantenmechanische Unschärfe $\delta \theta$ ist dann gerade gleich dem klassischen Bild $|d\theta/dp| \delta p$ des Stoßparameterintervalls δp . Verwenden wir die Näherung

$$\theta(p) \cong \frac{Z_2 e_0^2}{E p} e^{-p/2a_{TF}}$$

und führen wir den Bohr-Parameter $\kappa = \frac{Z_2 e_0^2}{\hbar E}$ ein,
 so ergibt sich:

$$(\delta \theta / \theta)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta \theta_{\text{Min}}}{\theta} \right)^2 = \frac{1}{2\kappa} \left(1 + \frac{p}{2a_{TF}} \right) e^{p/2a_{TF}}$$

bei

$$(\delta p / p)^2 = \frac{1}{2\kappa} \frac{e^{p/2a_{TF}}}{1 + (p/2a_{TF})} .$$

Die χ -Werte des Experiments lassen sich mit $12 \gtrsim \chi \gtrsim 4$ abgrenzen. Zur Erzielung minimaler Winkelunschärfe $\Delta\theta_{\min}/\theta$ kann in diesem Fall der Stoßparameter nur in Intervallen der relativen Breite $\delta p/p$ zwischen $\pm 10\%$ und $\pm 15\%$ festgelegt werden. Die quantenmechanische Unschärfe in der Transformation dieser Intervalle äußert sich dann in relativen Fehlern $\delta\theta/\theta$ zwischen $\pm 10\%$ und $\pm 20\%$. Eine Unschärfe des Stoßparameters von nur 10-15% läßt es vernünftig erscheinen, die in dieser Arbeit gewonnenen Meßergebnisse mit stoßparameterabhängigen Formulierungen der Ionisierungswahrscheinlichkeit zu vergleichen.

4. Aufbau und Funktion der Meßapparatur

4.1. Übersicht

Der apparative Rahmen des Experiments umfaßt: einen Teilchenbeschleuniger, eine Streukammer und einen elektronischen Meßteil (dieser wird in 4.6 beschrieben).

Der Beschleuniger^{/31/} ist eine elektrostatische Maschine, die von einer wasserstoffbeschickten Hochfrequenz-Ionenquelle^{/32/} gespeist wird. Der Arbeitsbereich liegt bei etwa 100 kV - 250 kV. Die Beschleunigungsspannung besitzt eine Langzeitkonstanz um $\pm 0.01 \%$. Als Fehler der absoluten Energiekalibrierung (mit der Resonanz der Kernreaktion $B^{11}(p, \alpha)Be^8$ bei 163.1 ± 0.4 keV^{/33,34/} kann etwa $\pm 2 \%$ angesetzt werden.

Der Aufbau in der Streukammer ist in Abbildung 4 skizziert. Zusätzlich sind die Steuermagneten 1 und 2 eingezeichnet, die eine wesentliche Funktion bei der Strahljustierung ausüben. Der horizontal ablenkende Magnet 1 ist zugleich Massenseparator (der Meßplatz steht unter 45° zum Strahlrohr) für die Protonenselektion aus dem Ionengemisch des Primärstrahls. Die Streukammer enthält: den Targetträger (10'), Detektoren (R, T, S und E_γ), Strahlblenden (4 und 9), einen Leuchtschirm (3), einen Faraday-Käfig (6) und eine Strahlsonde (8). In Anlehnung an das Prinzip der optischen Bank sind die einzelnen Bauelemente verschiebbar auf zwei parallelen Wellen angeordnet. Dieser ganze Komplex ist drehbar um einen Fixpunkt gelagert: der Fixpunkt liegt gerade am Ort der Strahleintrittsblende 4.

Unabhängig davon können die Bauteilgruppen (8, 9 und R) sowie (11 und S) in der Ebene senkrecht zu dem tragenden Wellenpaar (also ungefähr in der Querebene des Protonenstrahls) bewegt werden. Das ganze System ist auf den Deckel der Vakuumkammer montiert. Die angeführten Justiermöglichkeiten, mit Ausnahme der Längsverschiebung der Bauelemente auf den Wellen, können bei evakuierter Streukammer ausgeführt werden. Das Vakuum, das mit Öldiffusionspumpen erzeugt wurde, lag bei $2 \cdot 10^{-4}$ Pa.

4.2. Detektoren

Die Detektoren für das Koinzidenzexperiment müssen das in

3.1. hergeleitete Kriterium

$$q_A \gtrsim 10^5 \text{ s}^{-1}$$

erfüllen. In q_A gehen als Faktoren ein:

der Zählwirkungsgrad des Protonendetektors $\epsilon_{S'}$,
 der Geometriefaktor des Röntgen-Detektors $\Omega_r/4\pi$,
 die Fenstertransmission des Röntgen-Detektors σ ,
 dessen Zählwirkungsgrad ϵ_r und
 die Zeitauflösung $1/3\tau$ in der Koinzidenzmessung.

Die Definition von q_A enthält dabei bereits die Voraussetzung optimaler Zählgeometrie für den Nachweis der gestreuten Protonen. Der wirksame Raumwinkel des Detektors wird deshalb als Ring vorgegeben. Der ungestreute Protonenstrahl muß zentriert durch diesen Ring geführt werden (siehe 4.3.). Die Variation der Meßwinkel wird durch Änderung des Abstandes Target-Detektor erreicht. Das Verhältnis Ringbreite zu Ringradius entspricht ($\theta \lesssim 10^\circ$) der relativen Winkelunschärfe ($\Delta\theta/\theta$) = 0.1. Zur Abgrenzung des Detektor-Raumwinkels werden Ringblenden von 1 mm und 3 mm Radius verwendet. (die 1 mm-Ringblenden wurden von der Firma Siemens im Ätzverfahren aus 20 µm-dicken Cu-Be-Folien angefertigt).

Als Protonendetektoren werden planare Silizium-Oberflächensperrschichtdioden eingesetzt. (Die Anordnung Ringblende - Detektor ist in Abb. 4 mit 11 und S gekennzeichnet). Da die mittlere Energie für die Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares in Silizium (3.6 eV) klein gegen die Protonenenergie ist und letztere vollständig im Detektor aufgenommen wird (die Sperrschichttiefe ist $\gtrsim 100 \mu\text{m}$), ist die Nachweiswahrscheinlichkeit $\epsilon_S=1$. Insgesamt kann damit der Protonennachweis verlustfrei gestaltet werden.

Um den Beitrag der Oberflächensperrschichtzähler zur Zeitunschärfe τ der Koinzidenzmessung klein halten zu können, ist ein hohes Signal-zu-Rauschen-Verhältnis sowie eine kurze Signalanstiegszeit erforderlich (siehe 4.6.). Es werden deshalb kapazitätsarme - d.h. kleinflächige (die Zählflächen sind 25 mm^2 und 50 mm^2)-Detektoren verwendet. Ferner wird durch Kühlung mit flüssigem Stickstoff der Dioden-Leckstrom so stark abgesenkt, daß seine Fluktuationen nicht mehr zum elektronischen Rauschen beitragen. Die Unschärfe der Zeitdiskrimination im Protonenzweig der Koinzidenzmessung läßt sich durch diese Maßnahmen auf wenige Nanosekunden beschränken (vergl. 4.6.). Zur Kühlung ist der Detektor durch Kupferlitzen mit einem Dewar-Gefäß verbunden, das auf dem Deckel der Vakuumkammer angeflanscht ist. Dieses statische Kühlsystem wurde einer Durchlaufkühlung vorgezogen, weil Erschütterungen des Detektors Störsignale verursachen können.

Für den Nachweis der charakteristischen Röntgen-Strahlung wird das Verfahren direkter Photoelektronenvervielfachung angewandt. Weiche Röntgen-Quanten lösen aus CsJ-Schichten mit hohem Konversionsgrad Elektronen aus^{/35/}. Durch ein elektrisches Feld können diese Elektronen gesammelt und auf Energien beschleunigt werden, die eine nahezu verlustfreie Registrierung in einem Sekundärelektronenvervielfacher ermöglichen. Es wird sich zeigen (siehe 4.6. und 5.1.), daß diese Methode Zeitunschärfen τ kleiner 10 ns zuläßt. Bei Verwendung eines Si(Li)-Detektors müßte im Falle der Kohlenstoff-K-Strahlung (277 eV), $\tau \cong 400 \text{ ns}$ angesetzt werden^{/36/}. Für Zählrohre sind Zeitauflösungen gleicher Größenordnung zu erwarten.

Der Aufbau des schnellen Röntgen-Detektors (in Abbildung 4 mit T gekennzeichnet) ist in Abbildung 5 gezeigt. Als Photokathode dient ein Hohlzylinder aus Edelstahl, dessen polierte Innenseite mit einer etwa $5000 \text{ \AA}$ -dicken CsJ-Schicht bedampft ist (zum Aufbringen der Schicht ist der Zylinder in zwei Halbschalen teilbar). Der Nachweis der ausgelösten Elektronen erfolgt mit einem Kanal-Elektronenvervielfacher (channeltron).

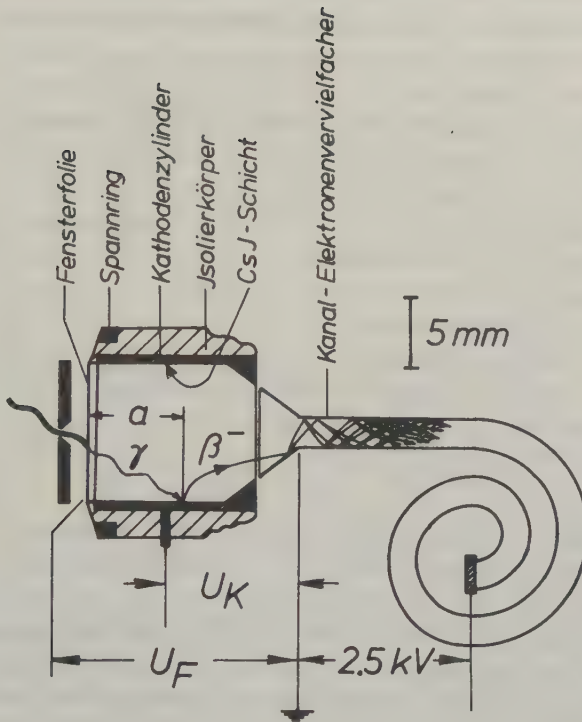


Abb. 5: Schneller Detektor für den Nachweis der weichen Röntgen-Strahlung im Koinzidenzexperiment

Im Experiment erfaßt die Eintrittsöffnung der Photokathode die emittierte Strahlung innerhalb eines Kegels mit dem Öffnungswinkel 140° . Es wird also nahezu 2π -Geometrie erreicht. Die Nachweisempfindlichkeit des Systems wird in 4.5. untersucht: es ergibt sich $\epsilon_f \approx 0.3$.

Da der Detektor selbst nicht energiedispersiv arbeitet, werden für die Diskriminierung des elektromagnetischen Strahlungsuntergrundes spezifische Filterfolien verwendet. Damit

wird zugleich der Notwendigkeit Rechnung getragen, gestreute Protonen abzublocken, die in dem Detektor-Raumwinkel einfallen. Für die Messungen an Aluminium ist die Filterschicht 5 μm -dickes Aluminium (auf einem 2.5 μm -dicken Mylar-Träger). Bei den Messungen an Kohlenstoff wird eine Kohlenstoffolie der Massenbelegung $750 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ verwendet. Die projizierte Reichweite von 240 keV-Protonen beträgt in Aluminium 3.6 μm und in Kohlenstoff $440 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ^{/37/}, bei einer Standardabweichung der Reichweitenverteilung von 0.3 μm (Aluminium) und 19 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (Kohlenstoff). Das selektive Verhalten der Filter für elektromagnetische Strahlung ist in Abbildung 6 dargestellt. Hier ist die Durchlässigkeit $\mathcal{D}$ der Folien als Funktion der relativen Strahlungsenergie E_γ/E_K (bezogen auf die Energie E_K der jeweils interessierenden K-Strahlung) aufgetragen. Entsprechend der Divergenz der Strahlung wurde $\mathcal{D}$ mit

$$\mathcal{D} = E_2(A D)$$

berechnet. E_2 ist das Exponentialintegral zweiter Ordnung, $A(E_\gamma)$ der Absorptionskoeffizient ^{/38/}, D die Foliendicke. Die Halbwertsbreiten der Transmissionsprofile (ca. 200 eV im Falle der Aluminium-K-Strahlung und ca. 15 eV für die Kohlenstoff-K-Strahlung) zeigen, daß der Filtereffekt der Folien mit dem Energieauflösungsvermögen von Si(Li)-Detektoren konkurrieren kann.

Diese Fensterbreiten sind genügend eng, um kontinuierliche Untergrundstrahlung, wie Nukleon-Nukleon-Bremsstrahlung oder Bremsstrahlung von Sekundärelektronen (siehe dazu 7.2.2), gegenüber der charakteristischen Strahlung vernachlässigen zu können. K-Strahlung, die von gestreuten Protonen in den Fensterfolien erzeugt wird, läßt sich ebenfalls gegenüber der K-Strahlung des Targets vernachlässigen. Photokathode und Kanal-Elektronenvervielfacher sind durch ein Gehäuse so vollständig gegen Störstrahlung geschützt, daß der Dunkelstrom (bei abgedecktem Fenster) im experimentellen Betrieb unter zwei Zählereignissen pro Minute liegt.

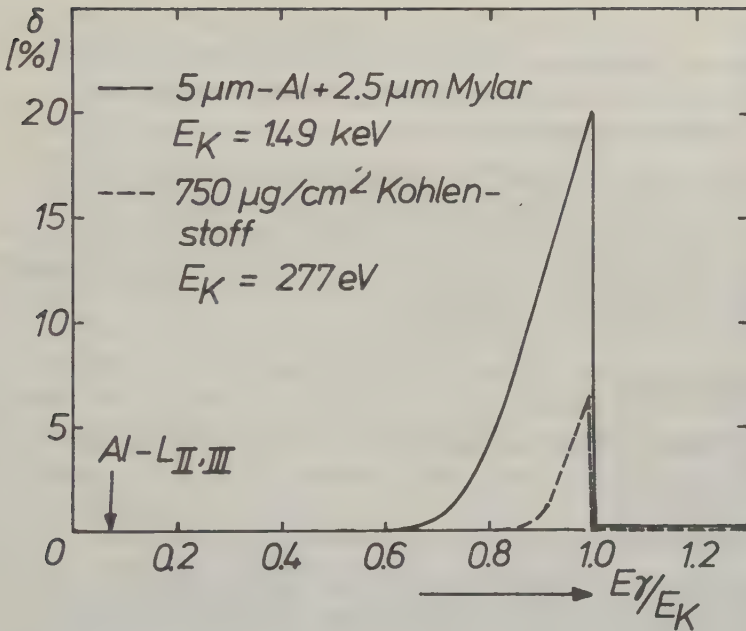


Abb. 6: Transmissionsprofile der Fensterfolien des Röntgen-Detektors

Mit der Transmission $\delta(E_K)$ der Fensterfolien (für die Aluminiumfolie ca. 20 %, für die Kohlenstofffolie ca. 5 %) sind die Daten zur Berechnung des Güteparameters für die Koinzidenzmessung q_A vollständig; es ergibt sich:

$$(q_A)_{\text{exp}} \approx 2 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}.$$

Die gewählte Detektorkombination erweist sich damit als geeignet für die Durchführung des Proton-Photon-Koinzidenzexperimentes mit den in 3.1 festgesetzten Qualitätsnormen.

Für die Spektroskopie rückgestreuter Protonen (siehe 2.3.) wird ein weiterer Halbleiterdetektor, in Form eines Ring-

detektors (in Abbildung 4 mit R gekennzeichnet), eingesetzt. Sein wirksamer Raumwinkel ist durch eine Ringblende definiert vorgegeben. Er wird in gleicher Weise, wie der Detektor (S) für die Vorwärtsstreuung, gekühlt.

Schließlich steht mit einem Durchfluß-Proportionalzählrohr (in Abbildung 4 mit E_{γ} bezeichnet) noch ein energiedispersiver Zähler für Röntgen-Strahlung zur Verfügung, der es erlaubt, den Zählwirkungsgrad des schnellen Röntgen-Detektors während der Koinzidenzmessung zu überprüfen.

4.3. Strahlführung

Für das Streuexperiment muß der Protonenstrahl folgende Bedingungen erfüllen:

die Strahldivergenz muß klein gegen den Streuwinkel sein,

der Durchmesser des Strahlflecks auf dem Target muß klein gegen den Durchmesser der Ringblende für die Winkelmessung sein, und

die Zentrierung des ungestreuten Protonenstrahls bezüglich der Ringblende muß gewährleistet sein.

Die Strahlführung in diesem Sinne ist in Abbildung 4 veranschaulicht. Die Strahldivergenz wird durch zwei Blenden (4 und 9) vom Durchmesser 100 μm , die den Abstand 200 mm haben, auf $\pm 0.029^\circ$ begrenzt. Die kleinsten Meßwinkel liegen bei 1° . Da die Entfernung der zweiten Blende (9) vom Target (10) nur 20 mm beträgt, entspricht der Durchmesser des Strahlflecks etwa dem Blendendurchmesser. Das Verhältnis Strahlfleckdurchmesser zu Ringblendendurchmesser bleibt mit 0.05 im Rahmen der gewünschten Winkelauflösung um $\Delta\theta/\theta = 0.1$. Die geringe Größe des Strahlflecks erlaubt es, die von der Targetfolie (10) überspannte Öffnung auf ca. 0.5 mm Durchmesser zu beschränken. Neben dem Vorteil für das Aufspannen dünner Folien ist damit auch der Ort der Röntgen-Emission reproduzierbar fixiert, so

daß die fest installierten Röntgen-Detektoren (T und E_{μ}) unter konstanten Raumwinkeln erscheinen.

Als ersten Schritt der Strahlführung wird der Protonenstrahl, der mit einem Strahlprofil der Halbwertsbreite um 1 mm aus dem Beschleuniger austritt, mit den horizontalen und vertikalen Steuermagneten (1 und 2) auf die Eintrittsblende 4 gerichtet. Die Eintrittsblende liegt hinter einer Öffnung in dem Fluoreszenzschirm 3, der den auftreffenden Strahl sichtbar macht. Für die Intensitätskontrolle steht der Faraday-Käfig 6 zur Verfügung. Nach Öffnen des Schiebers 7 kann der Strahl aus dem Faraday-Käfig austreten. Er wird nun mit einer Vier-Sektoren-Blende (8) geortet und Blende 9 in den Strahl geschwenkt. Dies geschieht durch Drehung der gesamten Anordnung ab Bauelement 3 um den in Blende 4 liegenden Drehpunkt. Der Strahl trifft nun in der Regel auf den Folienträger, der aus massivem Kohlenstoff besteht. Für die Justierung auf den freiaufgespannten Teil der Targetfolie kann das Rückstreupektrum, das mit dem Detektor R aufgenommen wird, Hilfestellung geben. Es läßt Aufschlüsse über die Zusammensetzung (anhand des elastischen Energieverlustes) und Dicke (anhand des inelastischen Energieverlustes) des getroffenen Materials zu. Die Justierung erfolgt durch Bewegung von Blende 9, deren Ausfahren aus dem fixiert stehenden Protonenstrahl durch Drehung des Gesamtsystems kompensiert wird. Um gezielt vorgehen zu können, ist der Folienträger mit einer ca. $100 \text{ \AA}$ -dicken und 0.5 mm breiten Goldbahn bedampft, die als vertikale Leitlinie auf die Streufolie zuführt. Durch Querführung des Strahls kann die Aufdampfschicht bequem erreicht werden, es erscheint dann im Rückstreupektrum eine scharfe Linie knapp unterhalb der Primärenergie (Abbildung 8). Diese Messung dient zugleich der Überwachung der Energieereinheit des Protonenstrahles. Der Leitlinie folgend wird der Strahl schließlich auf die Targetfolie gerichtet. Die optimale Einstellung ist wiederum aus dem Rückstreupektrum ablesbar.

Es verbleibt nun die Aufgabe, die Ringblende für die Winkelmessung so zu justieren, daß der ungestreute Strahl im Zentrum des Rings auftrifft. Dazu befindet sich dort eine Lochblende von ca. 80 μm Durchmesser. Mit einem Schieber kann zwischen Lochblenden- und Ringblendenbetrieb umgestellt werden. Der beschriebene Komplex ist (einschließlich des Detektors S) unabhängig von dem übrigen System in der Querebene des Strahls bewegbar, so daß mit der Lochblende ohne Eingriff in die justierte Anordnung die Vielfachstreuverteilung der Folie abgetastet werden kann. Da die Halbwertsbreite der Vielfachstreuverteilung klein gegen den Meßwinkel zu fordern ist, kann das Aufsuchen des Maximums der Streuverteilung als genügend empfindliche Methode zur Zentrierung benutzt werden.

4.4. Streufolien

Die Experimente an Kohlenstoff wurden mit Folien von 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ und 3 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ Massenbelegung durchgeführt. Für die Messungen an Aluminium wurden diese Folien mit 3 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ Aluminium beschichtet. Die Targetschichten wurden im technologischen Labor der Sektion Physik auf wasserlösliches Substrat aufgedampft. Die weitere Präparierung erfolgte durch Ablösen in destilliertem Wasser und Auffangen über der 0.5 mm-Bohrung des Targetträgers.

Der Targetträger ist im Experiment so angeordnet, daß die Folienebene aus der Querebene des Protonenstrahls einmal um 45° und senkrecht dazu um weitere 20° herausgedreht ist, um für den photoelektrischen Röntgen-Detektor und das Zählrohr Abschattungen zu vermeiden. Die wirksame Dicke der Folien liegt dadurch um 50 % höher als die oben angegebenen Werte. Nur für die 3 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ -Kohlenstofffolien beträgt der Kippwinkel insgesamt 30° , dadurch entsteht ein Dickenzuwachs von 15 %.

Das Aufstreuverhalten der Targetfolien zeigt Abbildung 7. Hier sind gemessene Streuverteilungen der Aluminium-Kohlenstoff-Folie und der 5 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ -Kohlenstofffolie dargestellt. Die Halb-

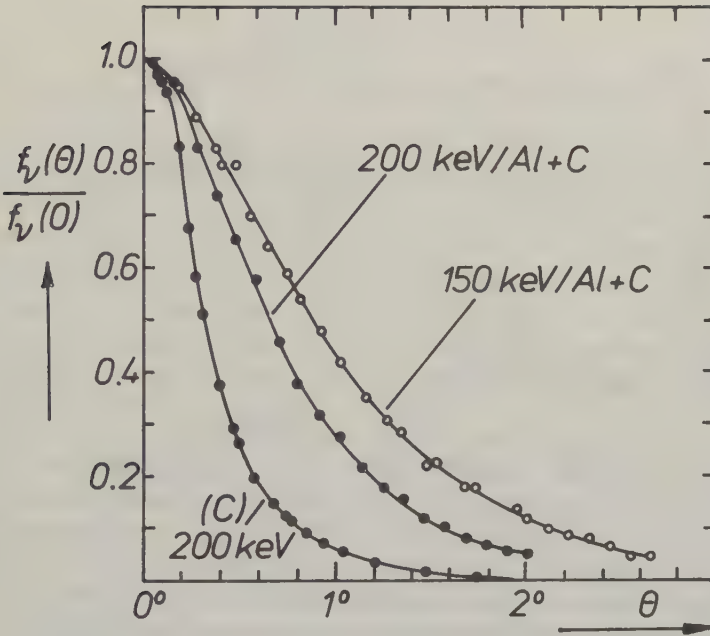


Abb. 7: Streuverteilungen der Targetfolien

wertsbreiten der Verteilungen liegen mit 0.65° (Al+C) und 0.33° (C) deutlich unter den Meßwinkeln ($\theta \gtrsim 2^\circ$ für Aluminium und $\gtrsim 1^\circ$ für Kohlenstoff). In 5.4. wird gezeigt werden, daß dennoch für kleine Meßwinkel die Vielfachstreuung bei der Interpretation der Koinzidenzausbeuten berücksichtigt werden muß.

Eine Massenanalyse des Targets wird durch Energieanalyse rückgestreuter Protonen erreicht. Abbildung 8 zeigt dies für den Fall der Aluminium-Kohlenstoff-Folie. Als Eichspektrum dient das Rückstreuungsspektrum, das eine dünne Goldschicht auf massivem Kohlenstoff (siehe 4.3) charakterisiert. Es ist gestrichelt in Abbildung 8 eingezeichnet. Die Massenanalyse der Aluminium-Kohlenstoff-Folie zeigt, daß ein beträchtlicher Anteil der Aluminiumschicht oxidiert ist. Verunreinigungen treten nur in geringem Umfang auf.

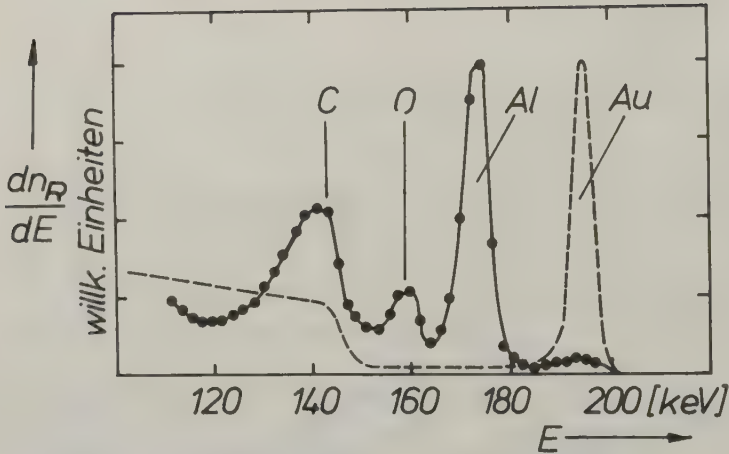


Abb. 8: Rückstreuungsspektrum aus dem Beschuß des Aluminiumtargets mit 200 keV-Protonen

4.5. Zählwirkungsgrad des schnellen Röntgen-Detektors

Für die Bestimmung der Ionisationswahrscheinlichkeit w^I wird als Normierungsgröße die Nachweisempfindlichkeit $\mathcal{E}_\gamma$ des schnellen Röntgen-Detektors für die jeweils untersuchte charakteristische Röntgen-Strahlung benötigt (siehe 2.2.). Die Messung von $\mathcal{E}_\gamma$ im Rahmen des Koinzidenzexperimentes wird durch Einsatz von Referenzzählern bekannten Zählwirkungsgrades erreicht. Bei den Messungen an Kohlenstoff ist dies der Rückstreudetektor R (siehe 4.2.), dessen Zählwirkungsgrad $\mathcal{E}_R = 1$ ist (zum Verfahren siehe 2.3.). Bei den Messungen an Aluminium wird dazu ein Proportionalzählrohr verwendet. Dieser energiedispersive Detektor mißt, bei einem Zählwirkungsgrad $\mathcal{E}_\gamma = 1$, eine Ausbeute n'_γ an Aluminium-K-Strahlung. Es ist dann:

$$\epsilon_g = \epsilon'_g \frac{\delta' \Omega'_g \eta_g}{\delta \Omega_g \eta'_g}$$

(die gestrichenen Größen gelten für das Zählrohr).

Beide Verfahren setzen voraus, daß die Untergrunddiskriminierung im schnellen Röntgen-Zähler vollständig gelingt, da sonst zu hohe Werte für ϵ_g vorgetäuscht werden. Um die Zuverlässigkeit der angewandten Filtermethode (siehe 4.2) experimentell prüfen zu können, wird ϵ_g zusätzlich mit einer Anordnung bestimmt, die Untergrundfreiheit garantiert. Prüfkriterium ist die Übereinstimmung der so gemessenen wahren Nachweisempfindlichkeit mit dem Ergebnis, das sich für ϵ_g während des Koinzidenzexperiments einstellt.

Die Anordnung zur Messung von ϵ_g unter definierten Bedingungen zeigt Abbildung 9. Mit Elektronen angeregte charakteristische Röntgen-Strahlung wird durch ein Bragg-Spektrometer aus dem kontinuierlichen Untergrund ausgesondert. Die monochromatische Strahlung konstanter Intensität fällt wechselweise in den schnellen Röntgen-Detektor und in ein Proportionalzählrohr ein. Beide Zähler sind mit der gleichen Fensterfolie (6 μ -Mylar) ausgestattet, so daß der Zählwirkungsgrad des schnellen Röntgen-Zählers dem Zählratenverhältnis η_g / η'_g gleichkommt. Um die Bedingungen des Koinzidenzexperiments (isotrope Röntgen-Emission) zu simulieren, wird der kollimierte Röntgen-Strahl so ausgeblendet und der schnelle Röntgen-Detektor so gekippt, daß die Photokathode jeweils unter den gleichen Einfallswinkeln getroffen wird, wie sie im Koinzidenzexperiment auftreten. Der gemessene Zählwirkungsgrad ist dann ein lokaler Zählwirkungsgrad ϵ_{lok} , den wir als Funktion des Abstandes a von Detektorfenster und Strahlauffreffort (siehe Abbildung 5) angeben.

Für die spektrometrierten Röntgen-Linien (C-K, Al-K $_{\alpha}$, Fe-L $_{\alpha}$, Cu-L $_{\alpha}$, Mg-K $_{\alpha}$, Au-M $_{\alpha}$) liegt das Verhältnis des Linienmaximums zum Untergrund sowohl im Zählrohr, als auch im schnellen

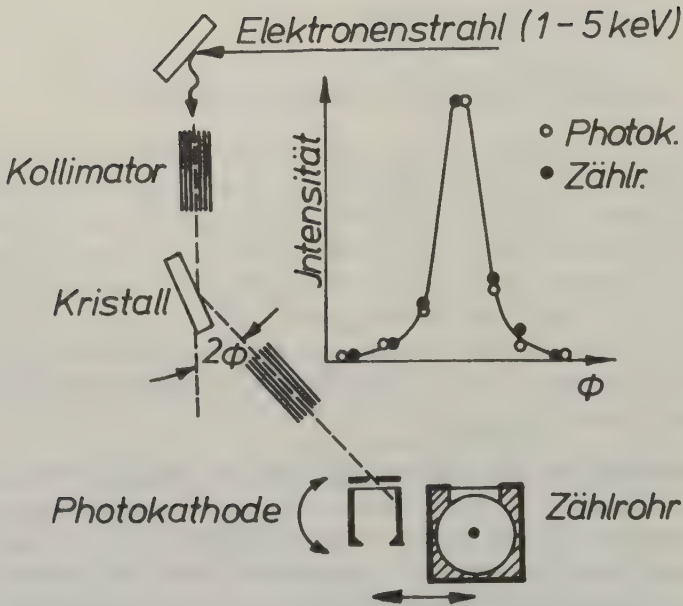


Abb. 9: Anordnung zur Messung der Nachweisempfindlichkeit des schnellen Röntgen-Detektors für weiche Röntgen-Strahlung

Röntgen-Zähler bei etwa 100. Die (normierten) Intensitätsverteilungen stimmen zudem in ihrem ganzen Verlauf sehr gut überein. Daraus kann gefolgert werden, daß in beide Zähler identische monochromatische Strahlung einfällt.

Der Arbeitspunkt des schnellen Röntgen-Zählers kann aus seinen Spannungscharakteristiken, die in Abbildung 10 angegeben sind, abgelesen werden. Für die Erzielung eines optimalen mittleren Zählwirkungsgrades (zur Definition des Mittelwerts siehe weiter unten) erweist sich eine an Fenster und Kathode angelegte Spannung von $U_F = U_K = -250 \text{ V}$ als zweckmäßig (zur Definition von U_K und U_F siehe Abbildung 5).

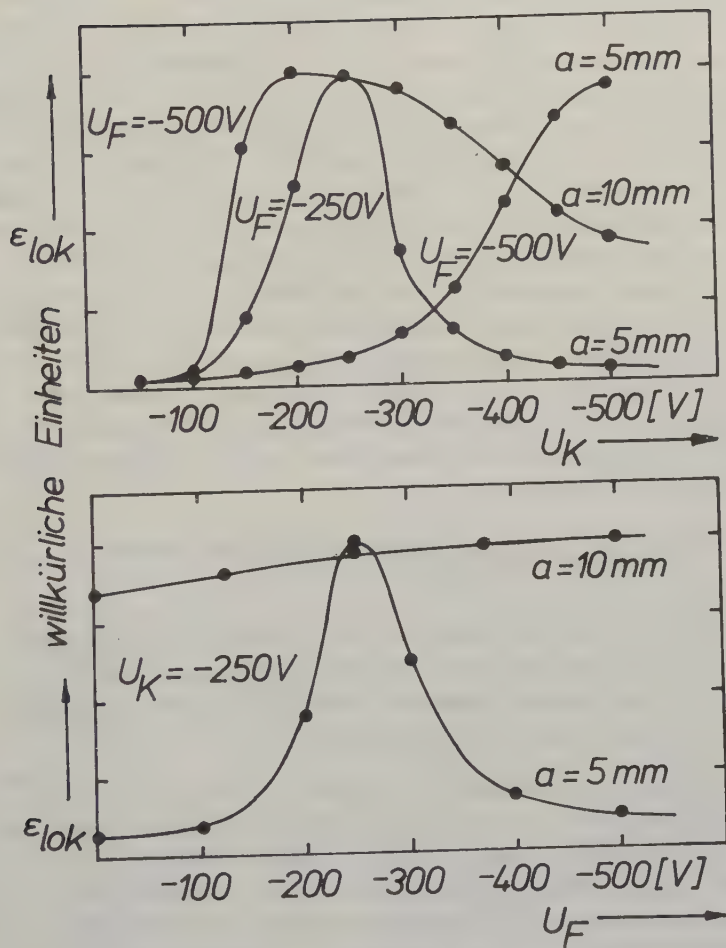


Abb. 10: Spannungscharakteristiken des schnellen Röntgen-Detektors

Unter diesen Bedingungen ergibt sich für die Quanten der Aluminium-K α -Strahlung eine Abhängigkeit $\mathcal{E}_{\text{lok}}(a)$, wie sie Abbildung 11 darstellt. Es werden Werte für $\mathcal{E}_{\text{lok}}$ um 30 % erreicht mit einer Tendenz der Zunahme mit größer werdendem a . Dieser Effekt erklärt sich aus der Verringerung der Tiefe der Röntgen-Absorption bei Verringerung des Winkels zwischen einfallendem Röntgen-Strahl und Kathodenoberfläche^{/39/}. Abbildung 11 zeigt ferner (gestrichelt eingezeichnet) die berechnete Verteilung der Fenstertransmission $d\mathcal{E}/da$ für Aluminium-K-Strahlung, wie sie unter den Bedingungen des Koinzidenzexperiments zu erwarten ist (bei einer Fensterfolie von 5 μm Aluminium auf 2.5 μm Mylar). Es ist ersichtlich, daß der überwiegende Teil der einfallenden Strahlung auf die effizienten Bereiche der Kathode fällt. Aus den in Abbildung 11 dargestellten Meßergebnissen läßt sich ein Sollwert für das Produkt aus Nachweisempfindlichkeit $\mathcal{E}_f$, Fenstertransmission $\mathcal{E}$ und Geometriefaktor $\Omega_f/4\pi$ für das Koinzidenzexperiment ableiten:

$$(\mathcal{E}_f \mathcal{E} \Omega_f/4\pi)_{\text{Al}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\mathcal{E}}{da} \right) \mathcal{E}_{\text{lok}}(a) da \cong 0.019 .$$

Der während der Koinzidenzmessung festgestellte Wert lag bei einem Mittel von 0.021 bei einer maximalen Abweichung von 7 %, zeigt also gute Übereinstimmung. Damit ist die Untergrundfreiheit in ausreichendem Maß nachgewiesen.

Für Kohlenstoff ergibt sich in analoger Weise

$(\mathcal{E}_f \mathcal{E} \Omega_f/4\pi)_{\text{C}} \cong 0.005$. Hier lagen die zugehörigen Werte in der Koinzidenzmessung bis zu 50 % niedriger. Im Rahmen der in 5.2. getroffenen Feststellungen wird diese Abweichung als systematische Abweichung plausibel werden. In jedem Fall deutet dieser Befund nicht auf mangelhafte Diskriminierung von Störstrahlung hin.

Die Brauchbarkeit des schnellen Röntgen-Detektors im gesamten Bereich weicher Röntgen-Strahlung demonstriert schließlich Abbildung 12. Zwischen 277 eV und 2.12 keV Quantenenergie ergeben sich Zählwirkungsgrade zwischen 25 % und 65 %.

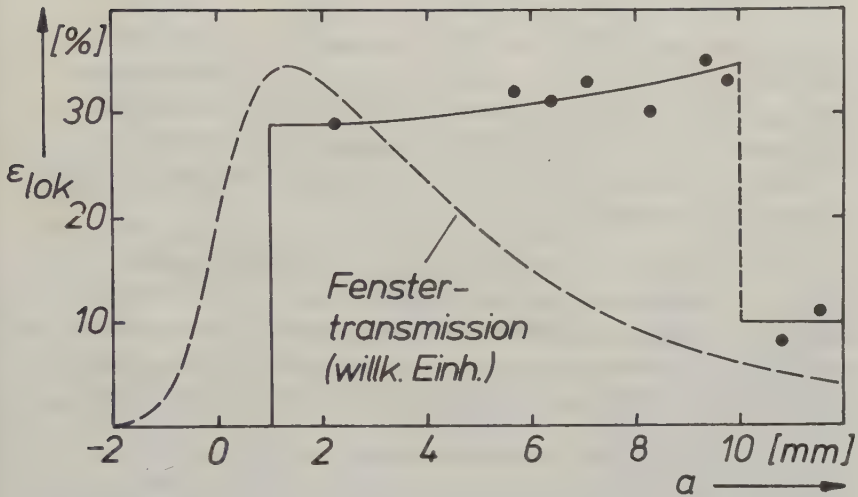


Abb. 11: Lokale Nachweisempfindlichkeit der Photokathode für Aluminium- K_{α} -Strahlung

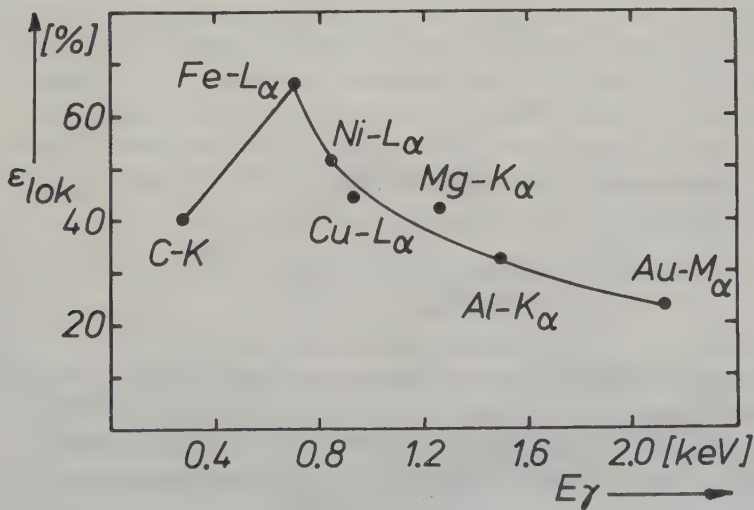


Abb. 12: Nachweisempfindlichkeit des schnellen Röntgen-Detektors als Funktion der Quantenenergie

4.6. Der elektronische Meßteil

Der elektronische Meßteil zur Verarbeitung der Signale der Detektoren S (für die Messung der Protonen im Koinzidenzexperiment), T (für die Messung der Röntgen-Quanten im Koinzidenzexperiment), R (für die Aufnahme des Rückstreupektrums) und E_γ (für die Energieanalyse der Röntgen-Emission) ist als Blockschaltbild in Abbildung 13 dargestellt.

Für die energieselektiven Detektoren S, R und E_γ werden rauscharme ladungsempfindliche Vorverstärker CP eingesetzt, deren Ausgangssignale in üblicher Weise von Filterverstärkern FA differenziert und integriert werden, um Impulsüberlagerungen zu beseitigen und das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis anzuheben.

Die Zeitmarken für die Koinzidenzmessung setzen die Diskriminatoren FD_S und FD_γ in Form schneller Normimpulse, wenn die Signale des Kanal-Elektronenvervielfachers T bzw. des Vorverstärkers zum Detektor S geeignete Schwellenwerte überschreiten. Die Zeitspektroskopie wird mit dem Zeit-Amplituden-Konverter TPC invers durchgeführt: die Signale der reaktionsauslösenden Protonen werden verzögert auf den Stop-Eingang des Konverters gelegt. Mit der geringen Zählrate i_γ im Röntgen-Detektor ($\lesssim 50$ Ereignisse/s) sind dann die Totzeitverluste (pro Koinzidenzereignis) aus der relativ langen Impulsverarbeitungszeit t_{TPC} (4 μ s) des Zeit-Amplituden-Konverters vernachlässigbar:

$$\frac{i_\gamma t_{TPC}}{1 + i_\gamma t_{TPC}} \lesssim 2 \cdot 10^{-4}.$$

Koinzidenzauslöschung durch statistische Stop-Impulse, die korrelierten Stop-Impulsen zuvorkommen, bleibt wegen der geringen Verzögerungszeiten t_d ($\lesssim 100$ ns) trotz Protonenzählraten i_s bis zu $3 \cdot 10^5$ Ereignissen/s im Rahmen weniger Prozent:

$$i_s t_d \lesssim 3 \cdot 10^{-2}.$$

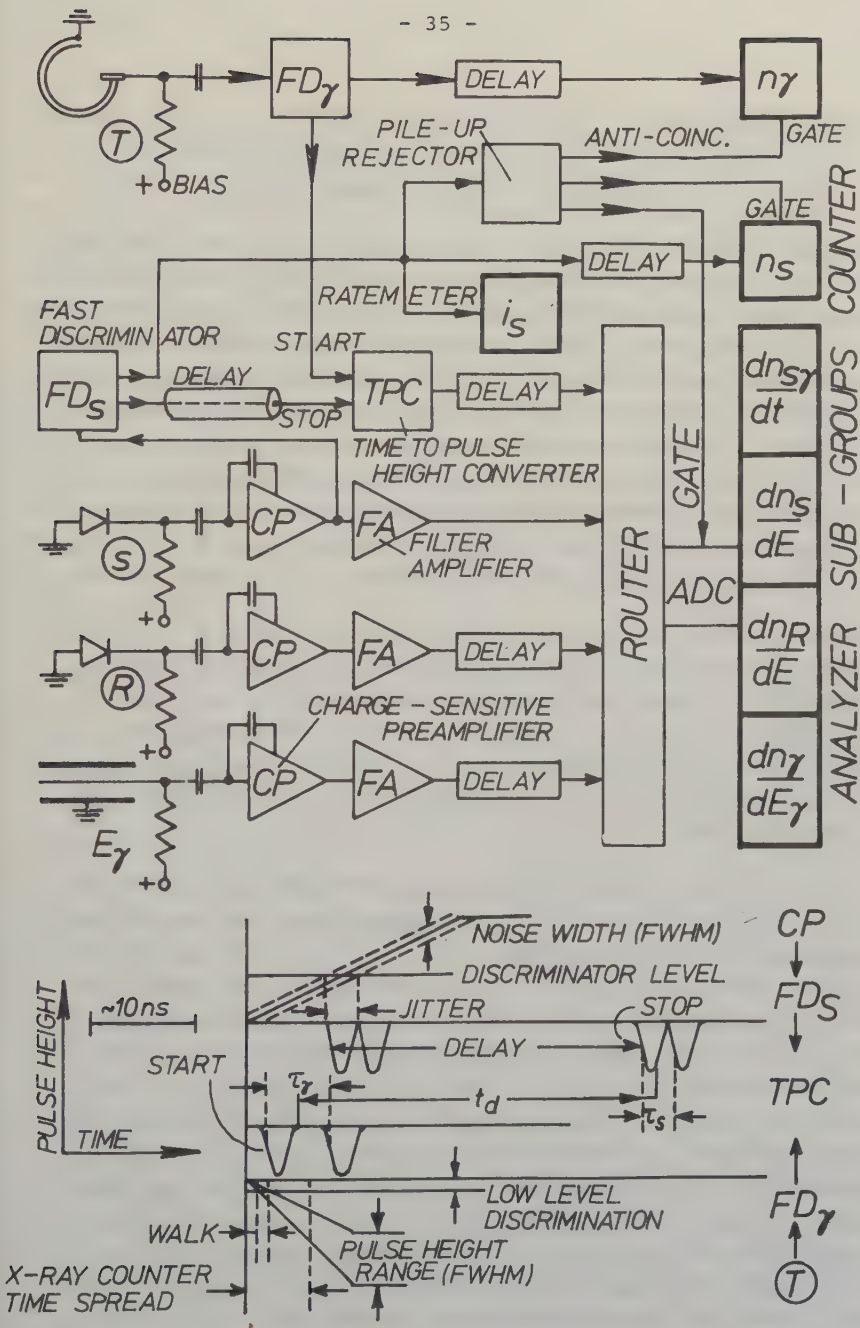


Abb. 13: Blockschaubild des elektronischen Meßteils und Diagramm zur Zeitspektroskopie.

Die Normimpulse der Zeitdiskriminatoren werden zugleich von 100 MHz-Impulszählern registriert, die damit die Röntgenausbeute n_{γ} und die Streuenausbeute n_s festhalten.

Die Impulshöhenanalyse für das Zeitspektrum $dn_{s\gamma}/dt$ und die drei Energiespektren dn_s/dE , dn_R/dE und dn'_{γ}/dE_{γ} wird mit nur einem Analog-Digital-Konverter ADC durchgeführt. Die Aufschlüsselung auf die Untergruppen des Vielkanalanalysators erfolgt durch koinzidenzgesteuerte Gates (Router). Das Spektrum dn_s/dE dient ausschließlich der Eichung des Integralkdiskriminators FD_s . In gleichzeitiger Messung werden deshalb nur das Zeitspektrum, das Rückstreupektrum und das Röntgenspektrum aufgenommen. Die hier anfallenden Impulsraten sind genügend klein ($\lesssim 10$ Ereignisse/s), daß die Zeitauflösung des Routing-Systems (10 μ s) ausreicht, um Zählverluste zu vermeiden.

Zur Kontrolle des primären Protonenstromes, der das Verhältnis echte Koinzidenzen zu Zufallskoinzidenzen bestimmt, wird die Streurrate i_s anhand der Impulsrate des Diskriminators FD_s beobachtet. Absicherung gegen den Effekt von Stromspitzen bietet ein Pile-up Rejector, der für zu dicht gedrängte Impulsfolgen innerhalb dieser Rate eine Blockierung sämtlicher Endsignale auslöst.

In Abbildung 13 (unten) ist das Zustandekommen der Unschärfe der Zeitmessung skizziert. Das Diagramm zeigt oben einen Ausgangsimpuls des Vorverstärkers CP, unten Impulse des Kanal-Elektronenvervielfachers T. In der Mitte sind die zeitmarkierenden Normimpulse dargestellt, die von den Diskriminatoren FD_s und FD_{γ} für den Zeit-Amplituden-Konverter TPC bereitgestellt werden. Die Zeitmarke des Diskriminators FD_s erfährt ihre Unschärfe τ_s vorwiegend aus der Rauschverschmierung der Anstiegsflanke des Vorverstärkerimpulses (jitter). Diese Unschärfe ist proportional der Impulsanstiegszeit und der Höhe des Rauschens. Dies begründet die in 4.2. genannten Maßnahmen der Detektorkühlung und der Verwendung kapazitätsarmer Detektoren (mit zunehmender Kapazität am Vorverstärkereingang wird sowohl die Impulsanstiegszeit verlängert, als auch das

Rauschen erhöht). Die Zeitunschärfe τ_j des Röntgen-Nachweises ist vorherrschend bedingt durch die Laufzeitstreuung der Elektronen im schnellen Röntgen-Detektor. Die hohe Eigenverstärkung des Kanal-Elektronenvervielfachers ($> 10^8$) ergibt ein so günstiges Signal-zu-Rauschen-Verhältnis, daß Einflüsse des Rauschens auf die Schärfe der Zeitdiskrimination vernachlässigbar sind. Kanal-Elektronenvervielfacher besitzen gegenüber Sekundärelektronenvervielfachern mit diskreten Dynoden den Vorzug linienhafter Impulshöhenverteilung (volle Halbwertsbreite $< 50 \%$). Die Zeitunschärfe, die aus der Streuung der Flankensteilheit von Impulsen verschiedener Höhe resultiert (walk), kann deshalb wegen der kurzen Impulsanstiegszeit ($< 10 \text{ ns}$) durch niedrige Diskriminatorschwelle klein gehalten werden. Die Gesamtunschärfe der Zeitmessung $\tau = \sqrt{\tau_s^2 + \tau_j^2}$ läßt sich aus den Abschätzungen für τ_s und τ_j in Abbildung 13 auf etwa 10 ns veranschlagen.

5. Auswertung der Meßdaten

5.1. Koinzidenzspektren

Ein typisches Zeitspektrum des Koinzidenzexperimentes ist in Abbildung 14 aufgezeichnet. Die erreichte Zeitauflösung liegt bei $\tau = 8$ ns. Der Arbeitspunkt des Röntgen-Detektors ist dabei auf optimalen Zählwirkungsgrad (siehe 4.5.) eingestellt. Bei Erhöhung der Spannungen an Fenster und Kathode des Röntgen-Detektors ist zwar eine Steigerung der Zeitauflösung des Systems auf etwa 5 ns möglich, diese wird jedoch durch einen Verlust an Nachweisempfindlichkeit kompensiert. Die Meßzeiten für die Aufnahme eines Koinzidenzspektrums lagen entsprechend den in 3.1. veranschlagten Zeiten bei etwa drei Stunden.

Für die Bestimmung der Koinzidenzausbeute n_s aus dem Zeitspektrum werden die Ausbeuten der im Koinzidenzbereich ($\pm 3\tau/2$ beiderseits des Koinzidenzmaximums) liegenden Kanäle des Vielkanalanalysators aufsummiert. Der Erwartungswert $(n_o)_{int.}$ für den darin enthaltenen Untergrundanteil kann durch lineare Interpolation bestimmt werden, da der Exponent $(n_s/T)t$, der den exponentiellen Abfall des Untergrundes charakterisiert, kleiner als $5 \cdot 10^{-2}$ ist. Der statistische Fehler der Koinzidenzausbeute ist

$$\Delta n_{sf} = [n_{sf} + (n_o)_{int.} + (k_1/k_2)(n_o)_{int.}]^{1/2}.$$

Dabei ist k_1 die Kanalzahl des Koinzidenzbereiches, k_2 die Zahl der zur Untergrundbestimmung herangezogenen Kanäle. An einigen Spektren wurde das Verfahren erprobt, die Koinzidenzausbeute als Integral über eine angepaßte Gaußkurve zu ermitteln. Die Anpassung erfolgte durch Minimierung der euklidischen Fehlernorm. Die prozentuale Abweichung der so ermittelten Koinzidenzausbeuten von den Ergebnissen des einfachen Summierungsverfahrens waren jedoch fühlbar kleiner als die sich aus beiden Verfahren in etwa gleicher Größe ergebenden Fehlernormen.

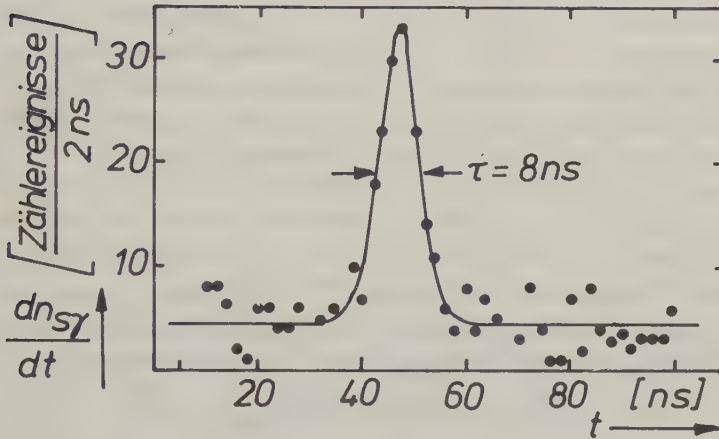


Abb. 14: Koinzidenzspektrum

5.2. Fluoreszenzausbeuten und integrale Wirkungsquerschnitte für Röntgen-Emission

Für die Bestimmung von Ionisationsdaten aus gemessenen Daten der Röntgen-Emission ist es gebräuchlich, Fluoreszenzausbeuten aus der Literatur heranzuziehen. Dies ist bei Kohlenstoff aber sicher kein taugliches Verfahren, wie eine Sichtung der experimentellen Arbeiten zur Ermittlung von Fluoreszenzausbeuten zeigt. Die dort angegebenen Werte variieren von $\omega = 8.8 \cdot 10^{-4} \pm 30 \%$ /46/ bis $\omega = 3.5 \cdot 10^{-3} \pm 10 \%$ /47/.

Vergleicht man, ebenfalls bei Kohlenstoff, verschiedene experimentelle Ergebnisse für den integralen Wirkungsquerschnitt der protoneninduzierten Röntgen-Emission der K-Schale, so ist eine vergleichbare Streuung zu beobachten. In Abbildung 15 sind Emissionsquerschnitte, die jeweils während einer Koinzidenzmessung ermittelt wurden (zur Methode siehe 2.3.), den Ergebnissen anderer Autoren gegenübergestellt. Die dabei verwendeten Targets waren sehr verschiedenartig: neben den Folien dieser Arbeit wurden gasförmiges CO und CH_4 (Harrison

et al. ^{/42/}), dickes Graphit (Khan et al. ^{/43/}) und eine wenige Monoschichten starke Kohlenstoffbedeckung auf einem Siliziumeinkristall (Van der Weg et al. ^{/44/}) untersucht. Da theoretische Erwägungen (siehe 6.2.) dafür sprechen, daß ein Einfluß des chemischen Bindungszustandes auf den Ionisationsquerschnitt nicht für Streuungen des in Abbildung 15 gezeigten Ausmaßes verantwortlich sein kann, ist es zunächst plausibel, diese der Fluoreszenzausbeute zuzuschreiben. Als experimenteller Hinweis in diesem Sinne können die in Abbildung 15 gegebenen Daten von Harrison und Mitarbeitern ^{/42/} einerseits und Daten für protoneninduzierte Auger-Emission aus Messungen von Toburen ^{/48/} andererseits gewertet werden. Das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte von CO und CH₄ ergibt für die Röntgen-Emission (bei 145 keV Protonen)

$$[\sigma^R(\text{CO})/\sigma^R(\text{CH}_4)] = 0.54 \pm 0.06$$

und für Auger-Emission (bei 300 keV)

$$[\sigma^A(\text{CO})/\sigma^A(\text{CH}_4)] = 0.96 \pm 0.12.$$

Effekte des chemischen Bindungszustandes können also im Gegensatz zur Röntgen-Emission bei der Auger-Emission, deren Wirkungsquerschnitt σ^A wegen $\omega \ll 1$ ja praktisch identisch mit dem Ionisationsquerschnitt σ^I ist, im Rahmen der Meßgenauigkeit von 12 % nicht festgestellt werden.

Insgesamt kommen wir damit zunächst zu dem Schluß, daß es bei Kohlenstoff zur Umrechnung von Daten protoneninduzierter Röntgen-Emission in die zugehörigen Ionisationsdaten situationsspezifischer Fluoreszenzausbeuten bedarf. Diese können experimentell als Verhältnis σ^R/σ^A (wegen $\sigma^A \approx \sigma^I$) bestimmt werden. Dabei ist σ^A nahezu unabhängig von der Elektronenkonfiguration der äußeren Schale, so daß für σ^A Daten aus der Literatur herangezogen werden können. Für die differentiellen Messungen dieser Arbeit wurden situationsspezifische Fluoreszenzausbeuten nach diesem Verfahren (siehe 2.3) ermittelt. Ergebnisse hierzu sind in Abbildung 16 zusammengestellt. Dabei zeigt sich eindeutig eine Zunahme der Fluoreszenzausbeute mit wachsender

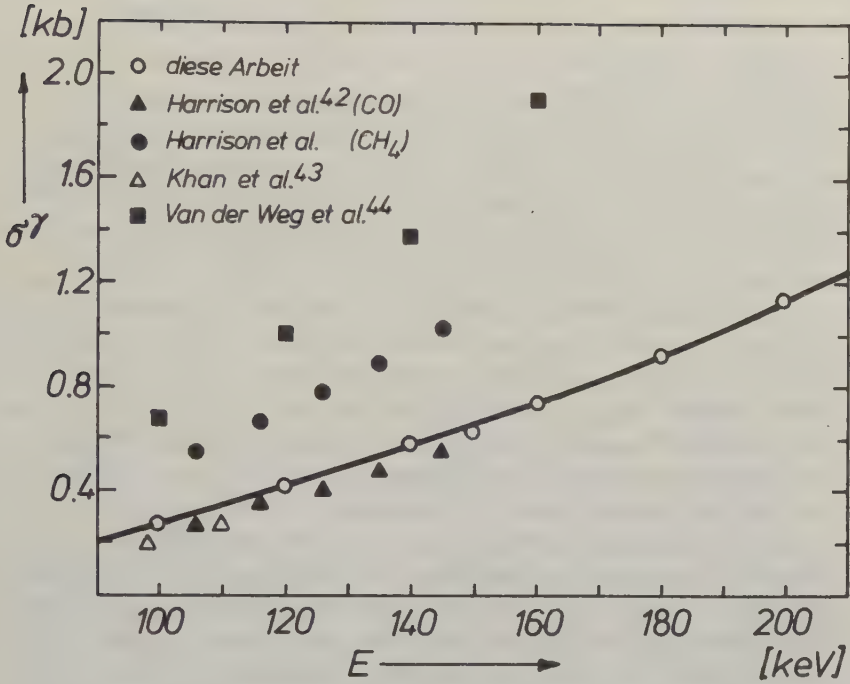


Abb. 15: Experimentelle integrale Wirkungsquerschnitte für protoneninduzierte Röntgen-Emission der K-Schale von Kohlenstoff

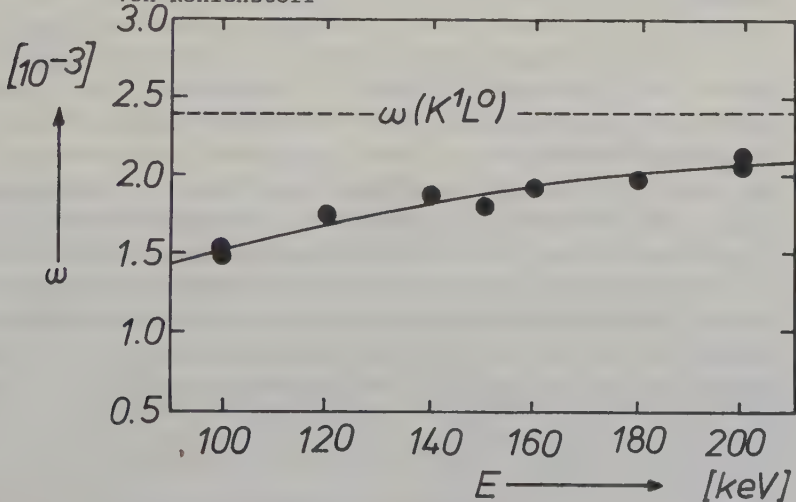


Abb. 16: Fluoreszenzausbeute als Funktion der Energie der ionisierenden Protonen

Protonenenergie. Eine solche Tendenz ist auch anderweitig beobachtet worden^{/24,48/}.

Diese Energieabhängigkeit der Fluoreszenzausbeute kann als Effekt der Mehrfachionisierung und deren Energieabhängigkeit gedeutet werden. Aus Beobachtungen von Satellitenlinien in Augerspektren^{/49/} ist bekannt, daß bei der Ionisation von Kohlenstoff durch Protonen der hier betrachteten Energien die Leerstellenkonfiguration K^1L^1 (in K- und L-Schale jeweils eine Elektronenlücke) in gleicher Größenordnung erzeugt wird, wie der einfach ionisierte Zustand K^1L^0 . Der Grad der Mehrfachionisierung nimmt dabei mit steigender Energie ab und zwar in einem Ausmaß, das vergleichbar ist dem Ausmaß der in Abbildung 16 gezeigten Zunahme der Fluoreszenzausbeute. Für den mehrfachionisierten Zustand ergeben sich gegenüber dem einfachionisierten Zustand zwei Effekte: einmal eine direkte Änderung der Fluoreszenzausbeute auf Grund der veränderten Elektronenkonfiguration, zum anderen eine Verschiebung des Spektrums der Röntgen-Emission zu höheren Energien (Wentzel-Druyvesteyn-Satelliten). Da in dieser Arbeit, wie auch in allen in Abbildung 15 zitierten Arbeiten, ein Detektorfenster mit einer Absorptionskante knapp oberhalb des Emissionsbands benutzt wird, können solche Verschiebungen zu erhöhter Absorption führen und damit zur Vortäuschung geringerer Fluoreszenzausbeuten^{/51/}. Die direkte Abhängigkeit der Fluoreszenzausbeute von der Elektronenkonfiguration sollte sich dagegen in einer Erhöhung der Fluoreszenzausbeute mit zunehmendem Grad an Mehrfachionisierung äußern.^{/50/} Der in Abbildung 16 gezeigte experimentelle Befund entspricht aber einer Verringerung der Fluoreszenzausbeute mit zunehmendem Grad an Mehrfachionisierung. Zu seiner Deutung muß damit der Absorptionseffekt herangezogen werden. Wesentlich für diese Interpretation sind die absoluten Werte der Fluoreszenzausbeute in Abbildung 16. Für sie muß erwartet werden, daß sie unter dem Wert liegen, den man für den einfach ionisierten Zustand K^1L^0 erhält. Fluoreszenzausbeuten für die Konfiguration K^1L^0 können

bei elektroneninduzierter Ionisation erwartet werden. Neueste Messungen dieser Art ^{/52/} an Methan (die chemische Struktur bedingt hier ein Emissionsspektrum ^{/53/}, das praktisch vollständig unterhalb der Absorptionskante von Kohlenstoff liegt), ergeben einen Wert von $\omega = (2.4 \pm 0.3) \cdot 10^{-3}$. Die gemessene Fluoreszenzausbeute in Abbildung 16 zeigt tatsächlich mit abnehmender Mehrfachionisierung (zunehmender Protonenenergie) von tieferen Werten her eine Annäherung an diesen Wert.

Abbildung 17 demonstriert den Effekt der Mehrfachionisierung auf die Lage des Emissionsbandes der Kohlenstoff-K-Strahlung von Graphit. Hier ist einem Emissionsspektrum aus der Bestrahlung mit 1 MeV Protonen ^{/40/} ein Emissionsspektrum gegenübergestellt, das mit Fluoreszenzanregung erzeugt wurde ^{/41/}. Dazu ist der experimentell ^{/45/} bestimmte Verlauf des Absorptionskoeffizienten einer aufgedampften Graphitschicht (dies entspricht den in dieser Arbeit verwendeten Fensterfolien) eingezeichnet. Die Anregung mit 1 MeV Protonen läßt eine höhere Ausbeute an Mehrfachionisierung erwarten wie die Fluoreszenzanregung. Dementsprechend weist das Spektrum der protoneninduzierten Emission gegenüber dem Spektrum der fluoreszenzangeregten Emission eine Schwerpunktsverschiebung zu Bereichen verstärkter Absorption auf. Für die um Faktoren 5 bis 10 geringeren Protonenenergien dieser Arbeit kann mit einer erheblichen Verstärkung des in Abbildung 17 noch relativ schwach ausgeprägten Effekts gerechnet werden.

Spektren der Kohlenstoff-K-Strahlung aus CO und CH₄ ^{/53/} zeigen, daß auch eine unterschiedliche chemische Struktur deutliche spektrale Verschiebungen bewirken kann. Während das Emissionsspektrum von CH₄ fast vollständig außerhalb des stark absorbierenden Bereichs liegt, ist das Emissionsspektrum von CO etwa zur Hälfte in diesen verschoben. Die in Abbildung 15 gezeigte Abweichung experimenteller Emissionsquerschnitte mit etwa

$$[\sigma^r(\text{CO}) / \sigma^r(\text{CH}_4)] \cong 0.5$$

kann damit ebenfalls als Absorptionseffekt gedeutet werden.

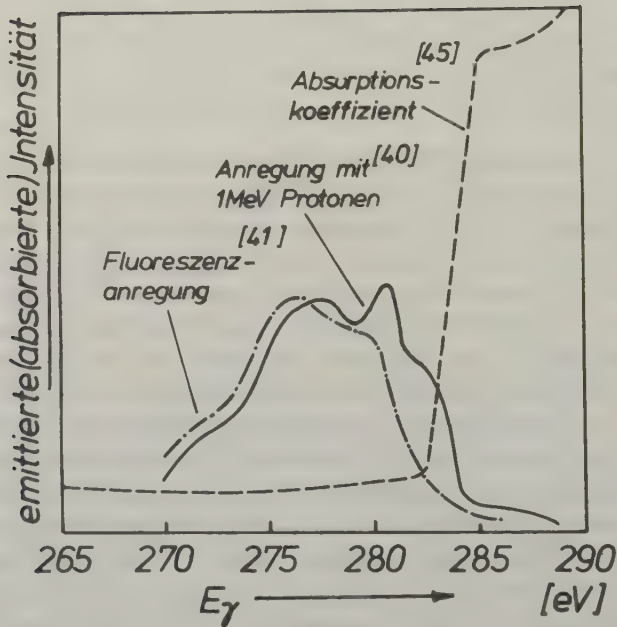


Abb. 17: Emissionsband der Kohlenstoff-K-Strahlung bei verschiedenartiger Anregung und Verlauf des Absorptionskoeffizienten jeweils für Graphit

Die Abhängigkeit experimenteller Fluoreszenzausbeuten für die Kohlenstoff-K-Emission sowohl von der spezifischen Art der Anregung als auch von der chemischen Struktur läßt sich also wohl vorwiegend auf Meßfehler in Form nicht erkannter Absorptionsverluste zurückführen. Die in Abbildung 16 angegebenen Fluoreszenzausbeuten sind dementsprechend nicht als echte Fluoreszenzausbeuten $\omega = (\delta^F / \delta^I)$ anzusehen, wohl aber als korrekte Meßwerte zur Ermittlung der Nachweiswahrscheinlichkeit ω_{eff} für Ionisation nach der Formel: $\omega_{\text{eff}} = \omega \delta E_{\gamma} \Omega_p / 4\pi$.

Gehen wir nun auf die Verhältnisse bei Aluminium ein. Die K-Emissionslinie von Aluminium liegt von der K-Absorptionskante so weit entfernt, daß selbst die K^1L^5 -Satellitenlinie (man kann solch hohe Mehrfachionisierung durch Anregung mit Schwerionen erreichen ^{/54/}) noch nicht absorbiert wird. Die Verwendung eines Aluminiumfensters vor dem Röntgen-Detektor bringt also keine Schwierigkeiten der bei Kohlenstoff festgestellten Art. Rechnungen von Bhalla^{/55/} zeigen zudem, daß Mehrfachionisierung in dem zu erwartenden Rahmen keine erheblichen Verschiebungen in der Fluoreszenzausbeute hervorruft. Seine Ergebnisse sind: $\omega = 0.041$ für K^1L^O und $\omega = 0.042$ für K^1L^1 . Ein aus Röntgenfluoreszenzmessungen^{/56,57/} erhaltener Wert ist $\omega = 0.038 \pm 5\%$. Wir erachten es als zulässig, diesen zur Bestimmung von ω_{eff} heranzuziehen.

5.3. Untersuchung inelastischer Einzelstreuung in Folien-Streuexperimenten

In dieser Arbeit wird die Streuung an einem makroskopischen Körper mit dem Ziel untersucht, Information über Zwei-Teilchen-Stöße zu erhalten. Der makroskopische Körper ist zwar eine dünne Folie, die Stoßzahl beim Durchgang eines Projektils liegt aber dennoch in der Größenordnung 100 (als Stoß soll jede Begegnung des Projektils mit einem Targetatom definiert sein, die unter einem Stoßparameter $p < p_{\text{max}}$ stattfindet, wobei $p_{\text{max}}^2 = N^{-(2/3)}$, N ist die Anzahldicke der Targetatome). Eine qualitative Aussage über die Folge an mikroskopischen Streuungen, die zur Streuung in den Meßwinkel θ führt kann für den Fall $\theta \gg \theta_{1/2}$ gemacht werden ($\theta_{1/2}$ ist die Halbwertsbreite der Vielfachstreuverteilung der Folie). Im wesentlichen kann dann eine einzige Großwinkelstreuung und viele Kleinwinkelstreuungen erwartet werden, wobei der Winkel der Großwinkelstreuung dem äußeren Meßwinkel sehr nahe kommt. Der Aspekt des koinzident mit Röntgen-Emission zu messenden Zwei-Teilchen-Stoßes fordert darüber hinaus eine gegenüber der Emission aus dieser Groß-

winkel-Einzelstreuung vernachlässigbare Emission aus der Kleinwinkel-Vielfachstreuung. Qualitatives Kriterium hierfür ist:

$$w^I(\theta) \gg w^I(\theta_{1/2}).$$

Um diesen Vorstellungen eine quantitative Fassung geben zu können, bestimmen wir zunächst die Stoßparameterverteilung $(d\nu/dp)_\theta$ der mikroskopischen elastischen Stöße bei vorgegebenem Streuwinkel θ der makroskopischen Streuung. Dazu betrachten wir eine (im Mittel) ν -fache Folge unkorrelierter und energieverlustfreier Streuungen, die sich zu einer Gesamtstreuung $\vec{\theta}$ addieren (Abbildung 18). (Die Vektorrepräsentation $\vec{\theta}$ von Streuwinkeln sei bezüglich der Richtung definiert durch die Projektion der Projektilbewegung in die Querebene des Primärstrahls, der Betrag sei θ). Für kleine Streuwinkel ($\tan \theta \cong \theta$) kann eine Kette von Streuungen durch Summierung dieser Vektoren dargestellt werden.) Wir suchen die Häufigkeit $d\nu_{\vec{\theta}|\vec{\theta}}$ von mikroskopischer Einzelstreuung unter $\vec{\theta}$ (in das Raumwinkelement $d\Omega_{\vec{\theta}}$) bei einer Gesamtstreuung unter $\vec{\theta}$. Sei nun $d\nu_{\vec{\theta}}$ die entsprechende Häufigkeit für $\vec{\theta}$ in der Streukette bei beliebigem Ergebnis für $\vec{\theta}$, $dw_{\vec{\theta}}$ die Wahrscheinlichkeit für Gesamtstreuung unter $\vec{\theta}$ (in das Raumwinkelement $d\Omega_{\vec{\theta}}$) und schließlich $dw_{\vec{\theta}|\vec{\theta}}$ die entsprechende Wahrscheinlichkeit für Gesamtstreuung unter $\vec{\theta}$ sofern die Streukette $\vec{\theta}$ enthält, so gilt:

$$d\nu_{\vec{\theta}|\vec{\theta}} dw_{\vec{\theta}} = dw_{\vec{\theta}|\vec{\theta}} d\nu_{\vec{\theta}}$$

(beide Seiten der Gleichung geben gerade die Häufigkeit für $\vec{\theta}$ und $\vec{\theta}$ an). Die $\vec{\theta}$ voraussetzende Wahrscheinlichkeit $dw_{\vec{\theta}|\vec{\theta}}$ für Gesamtstreuung unter $\vec{\theta}$ läßt sich als Wahrscheinlichkeit dafür schreiben, in $\nu-1$ Stößen das Resultat $\vec{\theta}-\vec{\theta}$ aufzubauen:

$$dw_{\vec{\theta}|\vec{\theta}} = f_{\nu-1}(\vec{\theta}-\vec{\theta}) d\Omega_{\vec{\theta}}$$

($f_{\nu-1}$ ist die resultierende Streuverteilung einer Kette von $\nu-1$ Streuern). Drücken wir $dw_{\vec{\theta}}$ durch das Gesetz für

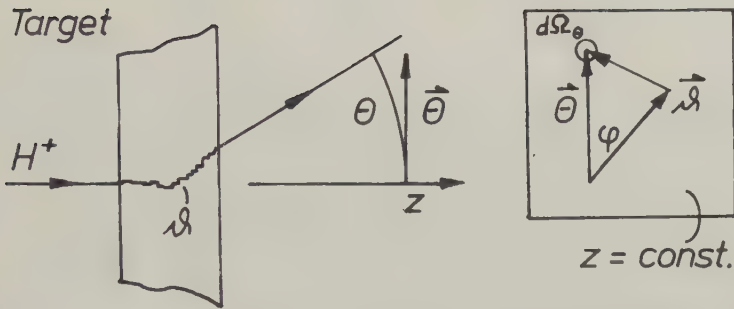


Abb. 18: Folienstreuung

ν -fache Streuung $f_\nu(\vec{\theta})$ und $d\nu_{\vec{s}}$ durch das ν -fache Einzelstreuengesetz $\nu f_1(\vec{s})$ aus, so wird:

$$\frac{d\nu_{\vec{s}}}{d\Omega_{\vec{s}}} = \nu f_1(\vec{s}) f_{\nu-1}(\vec{\theta}-\vec{s}) / f_\nu(\vec{\theta}).$$

Der Übergang zu skalaren Winkeln erfolgt durch Mittelung über den Azimut $\varphi = \angle(\vec{\theta}, \vec{s})$. Wegen der Isotropie in φ ist:

$$\left(\frac{d\nu}{d\Omega}\right)_\theta = \nu f_1(\vec{s}) \int_0^{2\pi} d\varphi f_{\nu-1}(\sqrt{\theta^2 + s^2 - 2\theta s \cos\varphi}) / f_\nu(\theta).$$

Die gesuchte Stoßparameterverteilung der mikroskopischen Stöße in der Streufolie bei gegebenem Meßwinkel θ ist dann:

$$\left(\frac{d\nu}{dp}\right)_\theta = (\mu L/A) 2\pi p \int_0^\pi \frac{d\varphi}{\pi} f_{\nu-1}(\sqrt{\theta^2 + s^2(p) - 2\theta s(p) \cos\varphi}) / f_\nu(\theta)$$

(μ ist die Massenbelegung der Folie, L die Loschmidt-Konstante, A die molare Masse der Targetatome). Da ν eine Zahl der Größenordnung 100 ist, kann $f_{\nu-1}$ in guter Näherung durch f_ν ersetzt werden; f_ν aber steht als gemessene Streuverteilung der Folie zur Verfügung (Abbildung 7).

Das Ergebnis gilt auch für Targets mit beliebigem Anteil an Fremdatomen. Hier sind μ und A sowie die Relation $\lambda = \lambda(p)$ für das reine Probenmaterial zu nehmen.

Als Beispiel zeigt Abbildung 19 (für verschiedene Meßwinkel θ) Stoßparameterverteilungen der mikroskopischen Streuung von 200 keV-Protonen im Aluminiumanteil der in 4.4. spezifizierten Aluminium-Kohlenstoff-Folie. Die Verteilungen $(d\nu/dp)_\theta$ besitzen einen Anteil mit ausgeprägtem Maximum bei $p(\theta)$, zu großen Stoßparametern schließt sich der statistische Anstieg $\propto 2\pi p$ an. Die linienhafte Verteilung um $p(\theta)$ entspricht der zu Anfang erwähnten Großwinkel-Einzelstreuung.

Die Stoßparameterverteilung der inelastischen mikroskopischen Streuung ist

$$(d\nu/dp)_\theta w^I(p) .$$

Mit ihrer Hilfe ist es nun möglich, die koinzidente Röntgen-Emission aus einer Einzelstreuung unter θ (diese Größe möchte man messen)

$$\omega w^I(p(\theta))$$

mit der koinzidenten Emission aus einer Folienstreuung unter θ (diese Größe mißt man in realiter)

$$\omega \int_0^\infty (d\nu/dp)_\theta w^I(p) dp$$

zu vergleichen. Beispiele von Verteilungen $(d\nu/dp)_\theta w^I(p)$ gibt Abbildung 20. Wiederum gelten die Rechnungen für 200 keV Protonen und das Aluminium-Target. Die Ionisationswahrscheinlichkeit $w^I(p)$ von Aluminium (gestrichelt eingezeichnet) ist theoretisch ermittelt (siehe 6.2.). Für den Meßwinkel $\theta = 10.8^\circ$ erweist sich die Verteilung $(d\nu/dp)_\theta w^I(p)$ als trennbar in eine Einzelstreuverteilung mit δ -Funktionscharakter und einen statistischem Anteil, wobei (sehen wir zunächst einmal ab von Komplikationen durch Fremdatome im Target) das Integral des Einzelstreuanteils gerade in guter Näherung

$$w^I(p(\theta)) \text{ ergibt,}$$

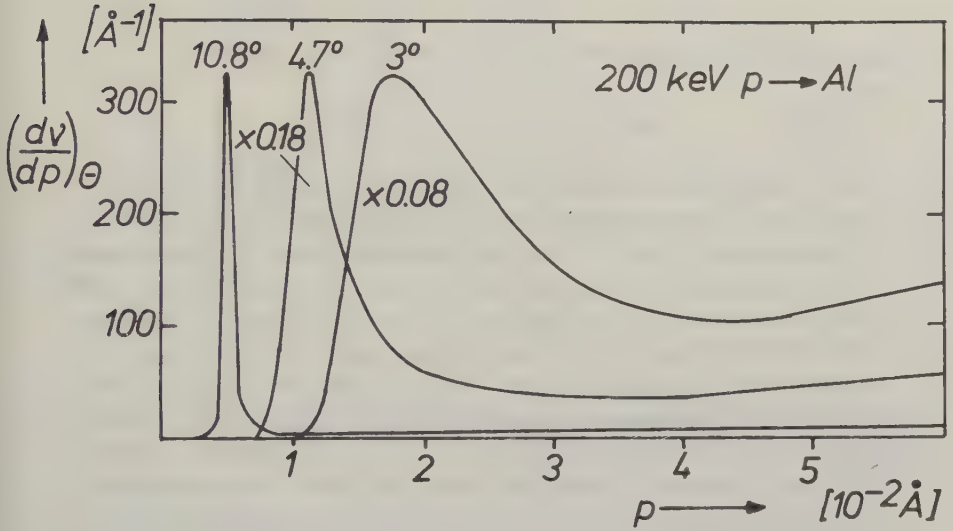


Abb. 19: Stoßparameterverteilungen der elastischen mikroskopischen Streuung im Aluminium-Target (der Maßstab der Ordinate ist jeweils mit dem angegebenen Faktor zu multiplizieren).

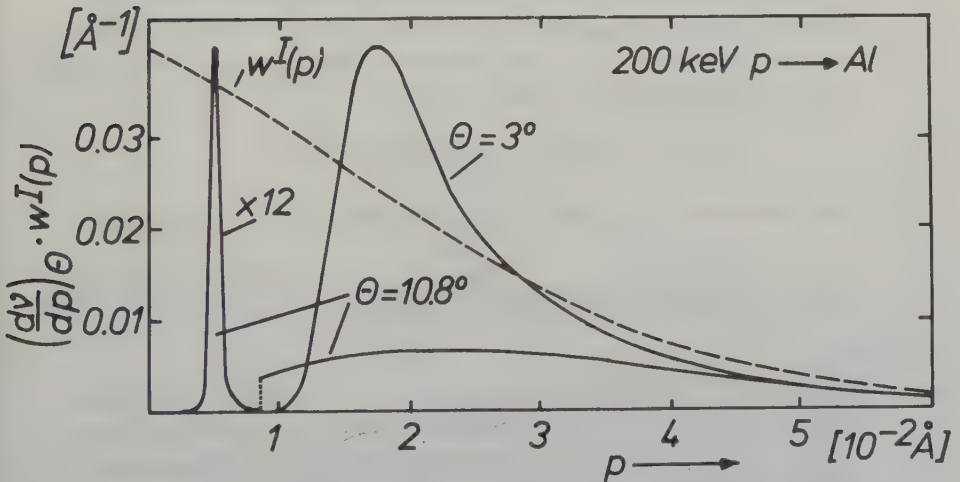


Abb. 20: Stoßparameterverteilungen der inelastischen mikroskopischen Streuung im Aluminium-Target

das Integral des statistischen Anteils ergibt gerade

$$(\mu L/A) \delta^I.$$

Die Röntgen-Emission aus einer Folienstreuung unter θ ist hier also in guter Näherung die Summe aus der Emission einer Einzelstreuung unter θ und der Emission einer statistischen Folienstreuung. Der statistische Anteil der Emission ist nicht vernachlässigbar, kann aber aus der Massenbelegung μ der Folie und dem integralen Emissionsquerschnitt δ^I ermittelt werden. Für den Meßwinkel $\theta \approx 3^\circ$ zeigt Abbildung 20, daß die Stoßparameterverteilung der Großwinkel-Einzelstreuung nicht mehr scharf auf $p(\theta)$ lokalisiert ist und sich zudem nicht mehr vom statistischen Untergrund abgrenzen läßt. Die Entfaltung der Verteilungen $w^I(p)$ und $(dv/dp)_\theta$ ist in diesem Fall nicht mehr trivial.

5.4. Ionisationswahrscheinlichkeiten

Für die allgemeine Bestimmung der Stoßparameterabhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit $w^I(p)$ des Zwei-Teilchen-Stoßes aus Daten der Folienstreuung gehen wir von dem überstatistischen Anteil in der Stoßparameterverteilung der elastischen mikroskopischen Streuung aus:

$$g(p) = (dv/dp)_\theta - 2\pi p (\mu L/A).$$

Die zugehörige koinzidente Röntgenausbeute pro Proton ist:

$$\omega \int_0^\infty g(p) w^I(p) dp = \frac{n_{sr}}{n_s \delta \epsilon_f \Omega_f / 4\pi} - (\mu L/A) \delta^I = Y(\theta).$$

Abbildung 21 demonstriert im Bereich der Meßwinkel des Experiments an Aluminium (die Protonenenergie ist 200 keV) den Grad an Stoßparameterlokalisierung, der in den untergrundfreien Verteilungen $g(p)$ erreicht wird.

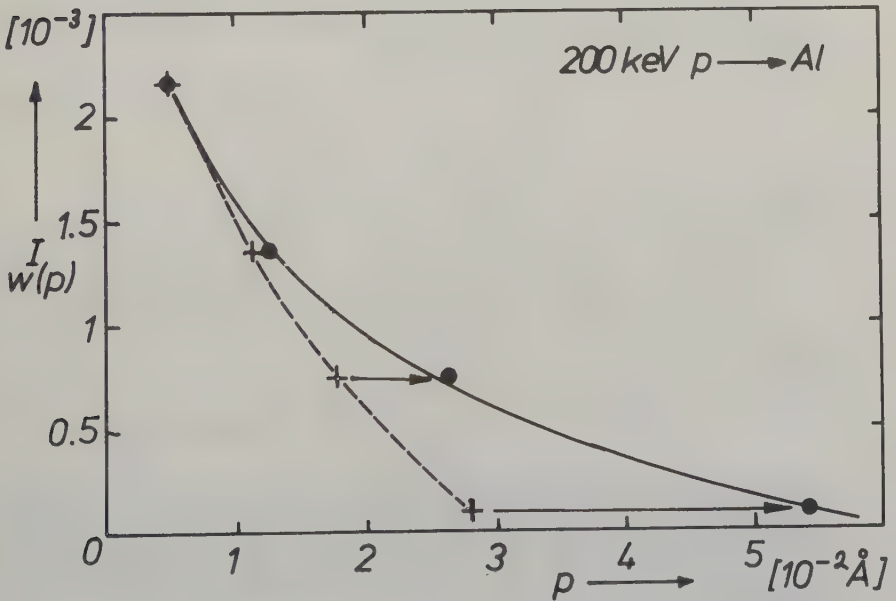
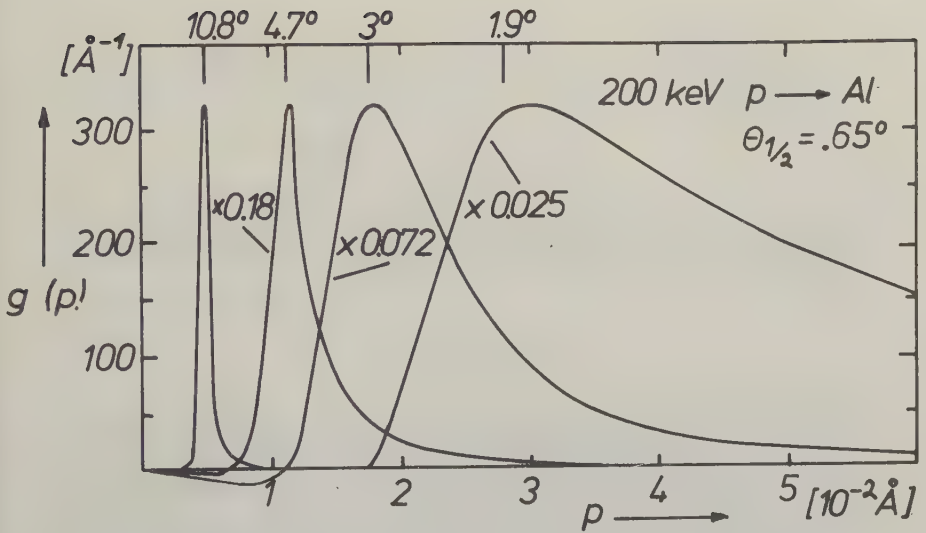


Abb. 21: Oben: Stoßparameterverteilung des überstatistischen Anteils der elastischen mikroskopischen Streuung für die Meßwinkel der unten gezeigten Ionisationswahrscheinlichkeiten. Unten: Experimentelle Ionisationswahrscheinlichkeiten als Funktion der Stoßparameter $p(\theta)$ (Kreuze) und der korrigierten Stoßparameter p_{eff} (Punkte).

Bei Meßwinkeln θ , die es erlauben, $g(p)$ durch eine δ -Funktion anzunähern, wird

$$\int_0^{\infty} g(p) w^I(p) dp = w^I(p(\theta))$$

und die Ionisationswahrscheinlichkeit beim Stoßparameter $p(\theta)$ ergibt sich aus der gemessenen reduzierten Röntgen-Ausbeute $Y(\theta)$ zu:

$$w^I(p(\theta)) = (1/\omega) Y(\theta) .$$

Dies ist allerdings nur für ein Target ohne Fremdatomanteile richtig. Im Falle der Aluminium-Kohlenstoff-Folie beispielsweise ist die Wahrscheinlichkeit $\int_0^{\infty} g(p) dp$ für Einzelstreuung (pro Proton) im Aluminiumanteil der Folie nicht identisch eins. Diese Wahrscheinlichkeit kann jedoch durch die Rückstreuerausbeuten n_R^{Al} und n_R^{total} vom Aluminiumanteil der Folie bzw. der gesamten Folie ausgedrückt werden:

$$\int_0^{\infty} g(p) dp = n_R^{Al} / n_R^{total} .$$

Hier wird im Falle δ -förmiger Verteilung $g(p)$:

$$(n_R^{total} / n_R^{Al}) \int_0^{\infty} g(p) w^I(p) dp = w^I(p(\theta))$$

und

$$w^I(p(\theta)) = (1/\omega) (n_R^{total} / n_R^{Al}) Y(\theta) = w_{exp}^I(\theta) .$$

Beim Übergang zu kleineren Meßwinkeln verlieren die Verteilungen $g(p)$ den Charakter von δ -Funktionen und die Ionisationswahrscheinlichkeit für den Stoßparameter $p(\theta)$ kann durch den Mittelwert

$$\langle w^I \rangle_{\theta} = (n_R^{total} / n_R^{Al}) \int_0^{\infty} g(p) w^I(p) dp$$

nicht mehr genügend genau angenähert werden. Wir führen deshalb einen korrigierten Stoßparameter p_{eff} ein, der die Bedingung

$$w^I(p_{\text{eff}}) = \langle w^I \rangle_{\theta}$$

erfüllt. Die Meßdaten liefern dann die Ionisationswahrscheinlichkeit bei diesem Stoßparameter:

$$w^I(p_{\text{eff}}) = w_{\text{exp}}^I(\theta).$$

Insgesamt verfahren wir nun wie folgt: Zunächst bestimmen wir $w^I(p)$ für diejenigen Meßwinkel θ , die es erlauben, auf eine Korrektur $p(\theta) \rightarrow p_{\text{eff}}$ zu verzichten, $w^I(p)$ sei danach im Stoßparameterbereich $p < p_g$ bekannt. Für $p > p_g$ ergänzen wir die Kurve linear bis zum Schnittpunkt p_0 mit der p -Achse, wobei p_0 als freier Parameter offen bleibt. Mit dem Meßwert $w_{\text{exp}}^I(\theta)$ bei einem geeigneten Meßwinkel θ wird das Geradenstück vermöge der Bedingung

$$w_{\text{exp}}^I(\theta) = \langle w^I \rangle_{\theta}$$

festgelegt (der Meßwinkel sollte dabei so gewählt werden können, daß die Verteilung $w^I(p)g(p)$ nur innerhalb der Grenzen p_g und p_0 merklich von Null verschieden ist). Die Kenntnis des Verlaufs von $w^I(p)$ in der Umgebung von $p(\theta)$ erlaubt es nun, dem Meßwert $w_{\text{exp}}^I(\theta)$ den Stoßparameter p_{eff} zuzuordnen. Dieses Verfahren einer stückweisen linearen Ergänzung wird sukzessiv fortgeführt.

Abbildung 21 zeigt für Messungen an Aluminium den Effekt der Korrektur $p(\theta) \rightarrow p_{\text{eff}}$. Im unteren Bild sind gemessene Ionisationswahrscheinlichkeiten $w_{\text{exp}}^I(\theta)$ einmal den Stoßparametern $p(\theta)$ (Kreuze) und einmal den korrigierten Stoßparametern p_{eff} (Punkte) zugeordnet. Im Bild darüber sind die Verteilungen angegeben, die jeweils die experimentellen Werte $w_{\text{exp}}^I(\theta)$ erzeugen. Abbildung 21 macht deutlich, daß auch für Meßwinkel, die üblicherweise als Streuwinkel des Einzelstreubereichs bezeich-

net werden, erhebliche Stoßparameterkorrekturen notwendig sind. Für den Meßwinkel $\theta = 3^\circ$ beispielsweise, der ca. noch einen Faktor 5 über der Halbwertsbreite $\theta_{1/2}$ der Vielfachstreuung liegt, beträgt die Stoßparameterkorrektur 45 %.

5.5. Meßfehler

Im Fehler der experimentellen Ionisationswahrscheinlichkeit $w_{\text{exp}}^{\text{I}}$ dominiert im allgemeinen der (in 5.1 definierte) statistische Fehler der Koinzidenzausbeute. Bei großen Stoßparametern wird außerdem die Unsicherheit in der Angabe der Targetdicke (Standardabweichung $\pm 10\%$) wesentlich (die Foliendicke geht im Rahmen der Reduzierung der koinzident gemessenen Röntgen-Emission der Folienstreuung auf die entsprechende Emission einer Einzelstreuung in $w_{\text{exp}}^{\text{I}}$ ein). Die Fehlerbalken in den später gezeigten w^{I} -p-Diagrammen beziehen sich auf diese beiden Arten von Fehlern. Qualitative Hinweise zum Fehler des Stoßparameters geben die Verteilungen $g(p)$ in Abbildung 21: der Fehler der Stoßparameterzuordnung $w^{\text{I}} \rightarrow p$ kann als klein gegen die Halbwertsbreite der jeweiligen Verteilung $g(p)$ betrachtet werden. Die Verhältnisse bei den Messungen an Kohlenstoff sind dabei vergleichbar denen bei den Messungen an Aluminium. Ein noch beträchtlicher systematischer Fehler ergibt sich mit $\pm 15\%$ für die Ionisationswahrscheinlichkeit von Kohlenstoff aus dem Fehler des Wirkungsquerschnitts für Auger-Emission ^{/24/}, der für die Bestimmung der Fluoreszenzausbeute benötigt wird. Alle übrigen Fehler, wie der Fehler der Fluoreszenzausbeute von Aluminium ($\pm 5\%$) der Fehler der Energiekalibrierung des Beschleunigers und die Fehler der apparativen Parameter der Detektoren sind von vernachlässigbarem Einfluß.

6. Theorie

In diesem Kapitel werden Methoden zur theoretischen Beschreibung der Coulomb-Ionisation im Grenzfall kleiner Z_1/Z_2 (im Sinne des in Abbildung 1 gezeigten Diagramms) erörtert. Modifikationen der Verfahren zur Ausweitung ihrer Gültigkeit werden dann anhand des Vergleichs experimenteller und theoretischer Daten in Kapitel 7 diskutiert.

6.1. Übersicht

Im folgenden wird die Coulomb-Ionisation allgemein als Übergang zwischen nichtrelativistischen stationären Ein-Elektron-Zuständen behandelt, wobei der Anfangszustand einem K-Elektron im Grundzustand des Targetatoms entspricht, der Endzustand einem Kontinuumselektron im Coulomb-Feld des um ein K-Elektron reduzierten Targetatoms. Der Übergang wird induziert durch die Coulomb-Wechselwirkung W_{PE} zwischen dem (mit nichtrelativistischer Geschwindigkeit bewegten) Proton und dem K-Schalen-Elektron. W_{PE} habe den Charakter einer kleinen Störung.

Das in diesem Sinne in weitestem Umfang zur Berechnung integraler Wirkungsquerschnitte für die Coulomb-Ionisation herangezogene Konzept ist das der ersten Bornschen Näherung (PWBA). Die inelastische Streuamplitude ist hier proportional dem Matrixelement

$$\langle f | W | i \rangle.$$

Der Wechselwirkungsterm $W = W(\vec{R}, \vec{r})$ ($\vec{r}$ ist die Koordinate des K-Elektrons, $\vec{R}$ die Projektilkoordinate, der Koordinatenursprung liege im Kern des Targetatoms) koppelt Zustände i und f , die jeweils durch das Produkt der ungestörten Wellenfunktion φ_i des K-Elektrons bzw. der Wellenfunktion φ_f des Kontinuumselektrons mit der ebenen Welle (als Repräsentant der Projektilbewegung) des Impulses $\hbar \vec{k}_i$ bzw. $\hbar \vec{k}_f$ beschrieben werden. Schreiben wir W als Summe aus Projektil-Targetkern-Wechselwirkung $W_{PK}(R)$ und Projektil-Elektron-Wechselwirkung

$w_{PE}(|\vec{R} - \vec{r}|)$ so wird aus

$$\langle f|w|i \rangle_{PWBA} = \int d^3R (w_{PK} \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_f | w_{PE} | \varphi_i \rangle) e^{i(\vec{K}_i - \vec{K}_f) \vec{R}}$$

sofort deutlich, daß (wegen der Orthogonalität $\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle = 0$) die Projektil-Targetkern-Wechselwirkung ohne Wirkung auf die Streuamplitude ist.

Betrachten wir an dieser Stelle den Einfluß des Ionisationsprozesses auf die Streuung ^{/8/}. Der minimale inelastische Impulsübertrag ist:

$$\hbar q_{min} = |\hbar \vec{K}_i - \hbar \vec{K}_f|_{min} = \sqrt{2M_1 E} - \sqrt{2M_1 (E - \Delta E_{inel.})}$$

($\Delta E_{inel.}$ ist der inelastische Energieübertrag, M_1 die Projektilmasse). Durch die lange Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung w_{PE}

werden kleine Impulsüberträge stark bevorzugt. Infolgedessen kann der minimal inelastisch übertragene Impuls zur Abschätzung des inelastisch übertragenen Querimpulses und damit zur Abschätzung charakteristischer Streuwinkel $\Delta \theta_{inel.}$ für die Streuung des Protons am K-Elektron herangezogen werden. Es ist

$$\Delta \theta_{inel.} \lesssim \frac{\hbar q_{min}}{M_1 V} = 1 - \sqrt{1 - (\Delta E_{inel.}/E)} \cong \frac{\Delta E_{inel.}}{2E}$$

(bei $(\Delta E_{inel.}/E) \ll 1$). $\Delta E_{inel.}$ wird annähernd durch die Bindungsenergie $\mathcal{E}_K$ des K-Elektrons wiedergegeben. Für die Bedingungen des Experiments an Aluminium ($\mathcal{E}_K = 1560$ eV, $E = 200$ keV) ergibt sich $\Delta \theta_{inel.} \lesssim 0.2^\circ$, der kleinste Meßwinkel ist hier 1.9° . Für Kohlenstoff liegen die Werte für $\Delta \theta_{inel.}$ gemessen an den kleinsten Meßwinkeln noch niedriger. Insgesamt wird damit die Winkelstreuung der Protonen bei ionisierenden Stößen vorwiegend von der Projektil-Targetkern-Wechselwirkung bestimmt.

Der differentielle PWBA-Ionisationsquerschnitt

$$d\sigma_{\text{PWBA}} \propto |\langle f | W | i \rangle_{\text{PWBA}}|^2 d\Omega$$

ist deshalb zur Beschreibung der inelastischen Streuverteilung ungeeignet. Eine angemessene Maßnahme zur Einbeziehung der Projektil-Targetkern-Wechselwirkung wäre die Verwendung gestörter Wellen (etwa Coulomb-Streuwellen) anstelle ebener Wellen (Distorted Wave Born Approximation). Ansätze in dieser Richtung sind vorhanden ^{/58/}. Differentielle DWBA-Ionisationsquerschnitte, die für einen Vergleich mit experimentellen Daten dieser Arbeit geeignet wären, stehen jedoch nicht zur Verfügung ^{/59/}.

Die Situation $(\Delta E_{\text{inel.}}/\theta) \ll 1$ bietet nun gerade die Voraussetzung für die Anwendbarkeit der semiklassischen Näherung (SCA), bei der die Projektilbewegung durch eine, vom inelastischen Prozeß entkoppelte, klassische Bahn $\vec{R}(t)$ vorgegeben wird. Der Übergang $i \rightarrow f$ wird induziert durch die zeitabhängige Störung $W_{\text{PE}}(\vec{r}, t) = (-Z_1 e_o^2 / |\vec{R}(t) - \vec{r}|)$. Die Übergangsamplitude erster Ordnung ist

$$T_{fi} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \varphi_f | W_{\text{PE}}(\vec{r}, t) | \varphi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t}$$

wobei $\hbar\omega_{fi} = \Delta E_{\text{inel.}}$. Durch Abseparierung der Zeitintegration mit Hilfe der Fourier-Darstellung der Coulomb-Wechselwirkung erhält man die für eine spätere Auswertung günstigere Form:

$$T_{fi} = \frac{iZ_1 e_o^2}{2\pi^2 \hbar} \int \frac{d\vec{q}}{q^2} \langle \varphi_f | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \varphi_i \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega_{fi}t - \vec{q}\vec{R}(t))}$$

$\hbar\vec{q}$ entspricht dem inelastischen Impulsübertrag. Die Zustandsfunktion φ_f des ins Kontinuum emittierten Elektrons sei bereits integriert über die Emissionsrichtung. Die Ionisationswahrscheinlichkeit w^I ergibt sich durch Summation über alle möglichen Endzustände:

$$w^I = 2 \int_0^\infty dE_f \sum_{\ell, m} |T_{fi}(\ell, m)|^2$$

(E_f ist die kinetische Energie des Kontinuumelektrons, l die Bahndrehimpulsquantenzahl, m die magnetische Quantenzahl, der Faktor 2 zur Berücksichtigung der 2 K-Elektronen gilt für $w^I \ll 1$). Die Projektilbahn kann dabei entweder durch den Stoßparameter p oder den Streuwinkel θ parametrisiert werden, so daß w^I als Funktion von θ oder p erhalten wird.

Eine grobe Abschätzung des Stoßparameterbereichs, in dem Ionisation zu erwarten ist, kann bereits aus dem ersten Ansatz für die Übergangsamplitude T_{fi} gewonnen werden. Nichtadiabatische Stöße sind nur für $\omega_{fi} t \gtrsim 1$ zu erwarten, da für $\omega_{fi} t \gg 1$ die rasche Oszillation des Exponentialterms zur Auslöschung von T_{fi} führt. Mit $t = p/v$ als Maß für die wirksame Stoßzeit ergibt sich eine Abgrenzung $p \gtrsim p_c$ des nichtadiabatischen Stoßparameterbereichs durch $p_c = v/\omega_{fi}$.

Eine weitere Methode zur Berechnung von Stoßparameterverteilungen der Ionisationswahrscheinlichkeit läßt sich aus der von Gryziński^{/60/} gegebenen allgemeinen Darstellung des klassischen Coulomb-Stoßes zweier Teilchen im Laborsystem entwickeln. Das Modell (Binary Encounter Approximation) betrachtet binäre Stöße des Projektils mit dem K-Elektron, das als quasifreies Teilchen angenommen wird. Ionisation tritt dann auf, wenn der Energieübertrag ΔE die Bindungsenergie ϵ_K übertrifft. Die atomare Bindung findet Ausdruck in einer dem K-Elektron aufgeprägten Geschwindigkeitsverteilung $\tilde{f}(v)$. Als Basis solcher Rechnungen dient der differentielle Wirkungsquerschnitt im Laborsystem für einen Energieübertrag aus $[\Delta E, \Delta E + d\Delta E]$ im isotropen Coulomb-Stoß zweier Teilchen der Geschwindigkeiten V und v sowie der Massen M und m :

$$(d\sigma)_{BEA}(V, v, M, m) / (d\Delta E) \quad d\Delta E.$$

Exakt berechnet wurde dieser Wirkungsquerschnitt von Gerjuoy^{/61/} und Vriens^{/62/}. In bereits integrierter Form ist:

(die Ladungszahlen der Teilchen sind gleich 1 gesetzt)

$$\int_{\Delta E} \frac{d\sigma_{BEA}}{d\Delta E'} d\Delta E' = \frac{\pi e_0^4}{3 V^2 v} \left\{ \begin{array}{ll} \left(-\frac{2v^3}{\Delta E^2} - \frac{6v}{m\Delta E} \right) & \text{für } 0 < \Delta E < b \\ \left(3 \frac{(V/M) - (v/m)}{\Delta E} + \frac{v'^3 - v^3 - V^3 - V'^3}{\Delta E^2} \right) & \text{für } b < \Delta E < a \\ \left(-\frac{2V^3}{\Delta E^2} \right) & \text{für } \Delta E > a, 2mv > (M-m)V \\ 0 & \text{sonst} \end{array} \right.$$

wobei

$$a = \frac{2mM}{(m+M)^2} [MV^2 - mv^2 + vV(M-m)] ,$$

$$b = \frac{2mM}{(m+M)^2} [MV^2 - mv^2 - vV(M-m)] ,$$

$$V' = \sqrt{V^2 - (2\Delta E/M)} \quad \text{und} \quad v' = \sqrt{v^2 + (2\Delta E/M)} .$$

Ordnet man M und V dem Projektil, m und v dem K-Elektron zu, so erhält man als integralen BEA-Ionisationsquerschnitt:

$$\sigma_{BEA}^I = 2 \int_0^\infty 4\pi v^2 dv \tilde{\rho}(v) \sigma_{BEA}$$

mit

$$\sigma_{BEA} = \int_{E_K}^E d\Delta E \frac{d\sigma_{BEA}}{d\Delta E}$$

Für $\tilde{\rho}(v)$ kann die quantenmechanisch berechnete Geschwindigkeitsverteilung des K-Elektrons verwendet werden. Führt man das klassische Modell konsequent fort, so kann bei einer räumlichen Verteilung $\rho(r)$ und einer lokalen Geschwindigkeit $v(r)$ der K-Elektronen, die Wahrscheinlichkeit für K-Ionisation durch ein Projektil, das sich entlang des Wegelements ds am Ort $R = r$ mit der Geschwindigkeit $V(R)$ bewegt, angesetzt werden mit:

$$dw_{BEA}^I = ds 2\rho(R) \sigma_{BEA}(V(R), v(R)) .$$

Die Gleichsetzung von Projektilkoordinate R und Elektronkoordinate r rechtfertigt sich dadurch, daß nur in engen Stößen die zur Ionisation notwendige Energie übertragen werden kann ^{/64,65/}. Ort und Impuls des K-Elektrons lassen sich nun natürlich nicht in einer dem Modell angemessenen Näherung gleichzeitig lokalisieren. Wir betrachten $v(R)$ deshalb als eine mittlere am Ort R derart wirksam werdende Geschwindigkeit des K-Elektrons, daß

$$\int 2\pi p \omega_{BEA}^I(p) dp = \mathcal{G}_{BEA}^I.$$

Wird $\rho(R)$ vorgegeben, so ist $v(R)$ eindeutig durch diese notwendige Bedingung festgelegt ^{/63/}.

6.2. Die semiklassische Näherung für konstante Projektilgeschwindigkeit

Für konstante Projektilgeschwindigkeit V läßt sich der in 6.1. gewonnene Ausdruck für die SCA-Übergangsamplitude T_{fi} auf ein reines Integral über die Elektronenkoordinate reduzieren ^{/7,8/}. Beschreiben wir die Projektilbewegung durch

$$\vec{R}(t) = \vec{p} + \vec{v}t$$

($|\vec{p}\rangle = p$, $\vec{p} \cdot \vec{v} = 0$) so läßt sich die Zeitintegration ausführen zu

$$2\pi \delta(\omega_{fi} - \vec{v}\vec{q}) e^{-i\vec{p}\vec{q}}.$$

Die δ -Funktion projiziert die q -Integration in die Querebene der Projektilbahn. Ist $q_{\perp}$ die Projektion von q auf diese Ebene, so wird mit $z := (\vec{r}\vec{v})/v$:

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \frac{2iZ_1e_0^2}{\hbar V} \langle \varphi_f | e^{iz/p_e} \int_0^{\infty} dq_{\perp} \frac{q_{\perp}}{q_{\perp}^2 + p_e^2} \left(\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\varphi e^{iq_{\perp}|\vec{r}-\vec{p}| \cos \varphi} \right) | \varphi_i \rangle \\ &= \frac{2iZ_1e_0^2}{\hbar V} \langle \varphi_f | e^{iz/p_e} K_0(|\vec{r}-\vec{p}|/p_e) | \varphi_i \rangle \end{aligned}$$

(K_0 ist die modifizierte Bessel-Funktion zweiter Art der Ordnung Null).

Bang und Hansteen konnten zeigen, daß für Coulomb-Wellenfunktionen T_{fi} als eindimensionales Integral darstellbar ist ^{/7/}.
Schreibt man die Wellenfunktion des K-Elektrons

$$\varphi_i = N_i e^{-\alpha r}$$

und die Zustandsfunktion des Kontinuumselektrons ^{/66/} (in Kugelkoordinaten $r, \varphi, \tilde{\theta}$)

$$\varphi_f = N_f e^{im\varphi} P_1^{(m)}(\cos \tilde{\theta}) M_{i\eta, 1+1/2}(2ikr),$$

so ergibt sich:

$$|T_{fi}| = K(\ell, m) \int_0^\infty dt t^{m+1} j_m(pt) s^{\ell-m-2} C_{\ell-m}^{m+1/2}\left(\frac{q_0}{s}\right) (\alpha + i(s-k))^{-(2\ell+3)} |F_A|.$$

(α ist der reziproke K-Schalenradius, $k = (2m_e E_f)^{1/2}$, m_e ist die Elektronenmasse, $\eta = -\alpha/k$,

$$K(\ell, m) = \frac{2Z_1 e^2}{\hbar V} 2\pi^{3/2} |N_i| |N_f| \frac{(2m)!}{m! 2^m} \frac{(2\ell+2)!}{\Gamma(\ell+3/2)} R^\ell,$$

$$|N_i|^2 = \alpha^3 / \pi,$$

$$|N_f|^2 = \frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi (\ell+m)!} \frac{\alpha^3}{E_f} \frac{2 \prod_{v=0}^{\ell} (v^2 + \eta^2)}{\Gamma(2\ell+2)^2 (1 - e^{2\pi\eta}) \eta^4},$$

Γ ist die Gammafunktion,

$q_0 = 1/p_c$, $s^2 = t^2 + q_0^2$, die

$P_1^{(m)}$ sind zugeordnete Legendre-Polynome, die $M_{i\eta, 1+1/2}$ Whittaker-Funktionen, die J_m gewöhnliche Bessel-Funktionen und die $C_{1-m}^{m+1/2}$ Gegenbauer-Polynome,

$$F_A = F_A(2\ell+3, \ell+1, \ell+1+i\eta, 2\ell+2, 2\ell+2; \frac{2is}{\alpha+i(s-k)}, \frac{-2ik}{\alpha+i(s-k)})$$

ist eine Appell-Funktion /67/.

Eine weitere analytische Auswertung gelingt nur im Rahmen einer Näherung für $p_c \ll (1/\alpha)$ (das ist äquivalent zu $V/v_K \ll 1$). Hier kann man sich einerseits auf reine s-Streuung beschränken, andererseits ermöglicht eine Entwicklung des Integranden nach Potenzen von α/s und k/s die geschlossene Integration /7/ zu:

$$|T_{fi}| = K(0,0) \frac{\alpha}{4} p_c^4 \left[x^2 K_2(x) + (\alpha p_c)^2 \frac{1}{18} x^3 K_3(x) (-19 + 5 \frac{k^2}{\alpha^2}) + \dots \right]$$

($x = p/p_c$, die K_n sind modifizierte Besselfunktionen der Ordnung n).

Der erste Term der Reihe, mit seiner Generalisierung der Stoßparameterabhängigkeit, war bis zu den ersten auf der exakten Formulierung basierenden Computerrechnungen /68/ Standard für die Bestimmung differentieller Ionisationsquerschnitte.

In dieser Arbeit werden Stöße untersucht für die $p_c \alpha = 2 V/v_K \gtrsim 0.5$ ist; hier übertrifft der zweite Term der Entwicklung bereits den ersten Term. Es wurde deshalb auf die Integraldarstellung der SCA-Übergangsamplitude zurückgegriffen und ein Computerprogramm erstellt, das es gestattet, die Ionisationswahrscheinlichkeit als Funktion der Eingabeparameter l, m, p, E_K, V und α zu berechnen. In den Rechnungen wird, um jeweils der Abschirmung des zweiten K-Elektrons Rechnung zu tragen, $\alpha = (Z_2 - 0.3)/a_0$ gesetzt. Für E_K werden an Festkörpern bestimmte experimentelle Werte /69,70/ verwendet. Das K-Elektron wird dann durch einen Hamilton-Operator

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2 m_e} - \frac{(Z_2 - 0.3) e^2}{r} + V_S(Z_2)$$

beschrieben, in dem die Abschirmung der äußeren Elektronen durch

$$V_s(Z_2) = (Z_2 - 0.3)^2 R_y - \xi_K(Z_2)$$

berücksichtigt ist (R_y ist die Rydberg-Energie). In den folgenden Abbildungen sind Ergebnisse solcher Rechnungen zusammengestellt. Die Rechengenauigkeit wird (anhand von Stichproben erhöhter Genauigkeit) auf etwa 5 % geschätzt.

Abbildung 22 und Abbildung 23 zeigen die Ionisationswahrscheinlichkeit der K-Schale von Aluminium bzw. von Kohlenstoff für 200 keV Protonen. Bei Aluminium ($V/v_K = 0.26$) genügt es, s- und p-Streuung mitzunehmen, bei Kohlenstoff ($V/v_K = 0.62$) trägt (bei großen Stoßparametern) auch noch die d-Streuung fühlbar zur Ionisation bei. Inzwischen wurden Tabellen veröffentlicht^{/71/}, aus denen mit Hilfe von Skalengesetzen eine näherungsweise Berechnung von $w^I(p)$ möglich ist. Die Übereinstimmung der hier ermittelten Kurven mit Ergebnissen dieses Verfahrens ist im allgemeinen besser als 10 %, bei großen Stoßparametern traten für Aluminium Abweichungen bis zu 25 % auf.

In den Abbildungen 24 und 25 sind Energieverteilungen der ins Kontinuum emittierten K-Elektronen für verschiedene Stoßparameter und verschiedene Streuterme aufgezeichnet. Pauschal läßt sich die mittlere Energie der δ -Elektronen mit $\langle E_f \rangle \cong 250$ eV für Aluminium und mit $\langle E_f \rangle \cong 150$ eV für Kohlenstoff angeben.

An dieser Stelle sei kurz auf die Tatsache eingegangen, daß der experimentell untersuchte Ionisationsprozeß nicht am freien Atom, sondern im Festkörper stattfindet. Dies würde zur Folge haben, daß das asymptotische Verhalten der Kontinuums-Wellenfunktionen nicht durch ebene Wellen, sondern durch Bloch-Wellen beschrieben wird. Da jedoch der mittlere Betrag des Wellenvektors des Elektrons im Endzustand groß gegen die Ausdehnung der ersten Brillouin-Zone zu erwarten ist, sollten für die meisten Emissionsrichtungen ebene Wellen eine gute Näherung darstellen, so daß Festkörpereinflüsse auf die Ionisationswahrscheinlichkeit vernachlässigt werden können.

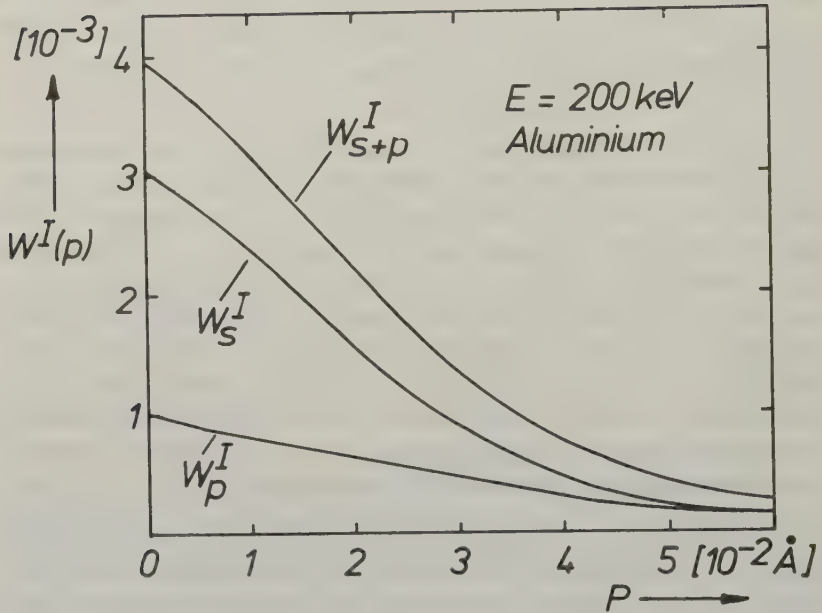


Abb. 22: Stoßparameterverteilung der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit (w_{s+p}^I) der K-Schale von Aluminium für 200 keV-Protonen; w_s^I ist der Anteil der s-Streuung, w_p^I der Anteil der p-Streuung.

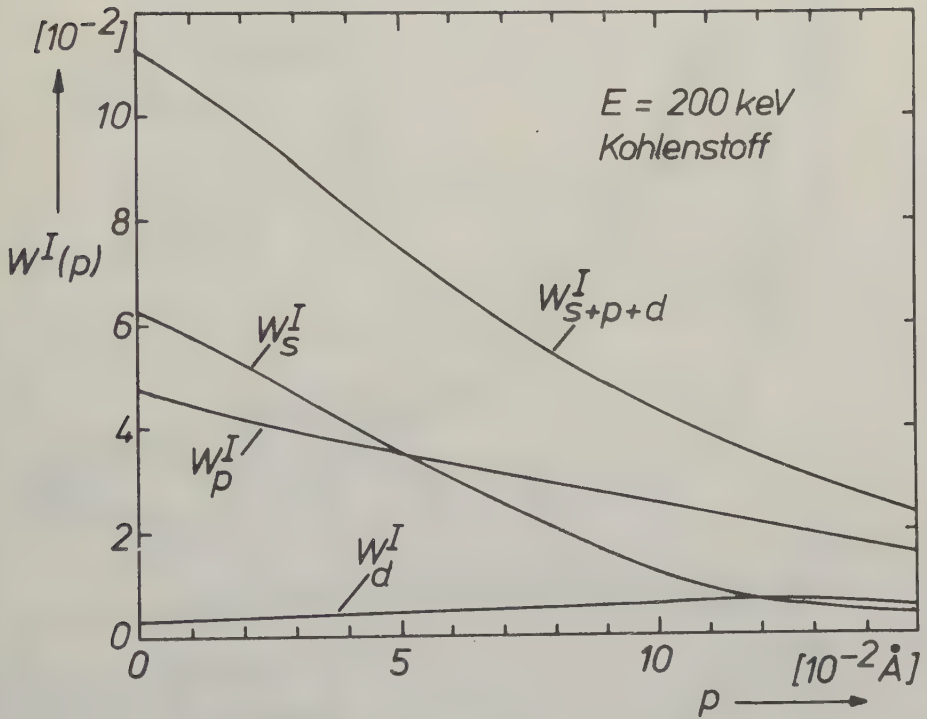


Abb. 23: Wie Abbildung 22 für Kohlenstoff

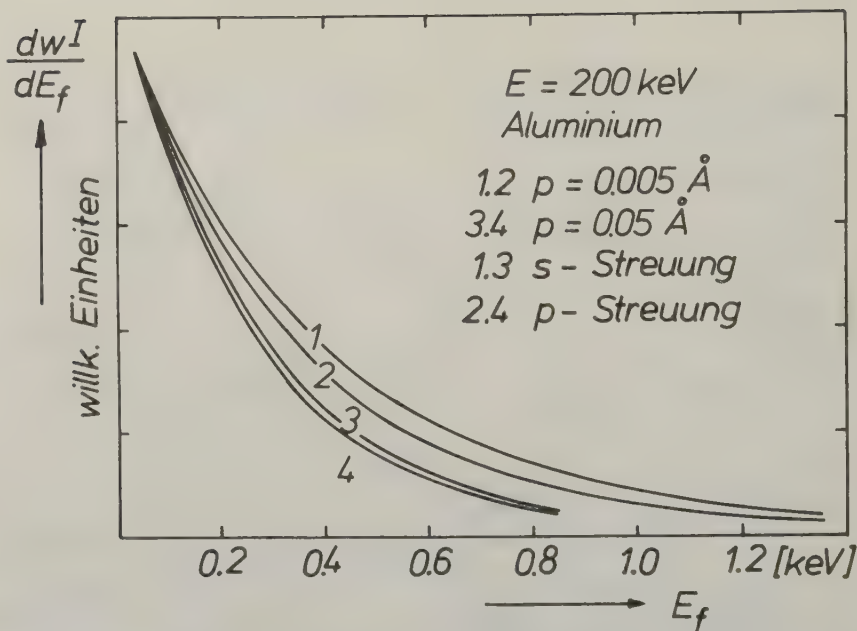


Abb. 24: Energiespektrum der δ -Elektronen

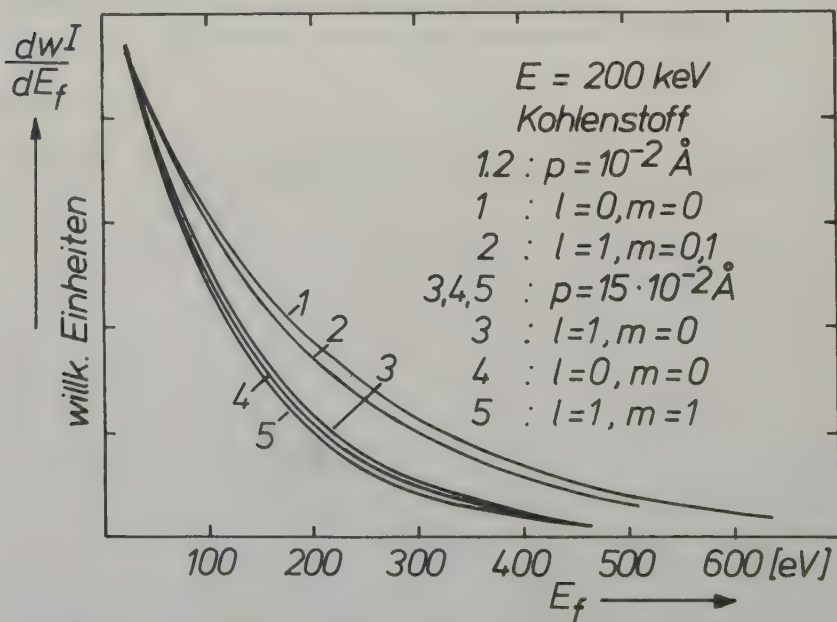


Abb. 25: Wie Abbildung 24

6.3. Die klassische Zweierstoß-Näherung im Ortsraum

Transformiert man den in 6.1. definierten integralen BEA-Ionisationsquerschnitt in den Ortsraum, so ergibt sich (in Zylinderkoordinaten):

$$\sigma^I(V) = 2 \int_0^\infty 2\pi p dp \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{dv}{dr} \frac{v^2}{r^2} \tilde{\rho}(v(r)) \mathcal{G}_{BEA}(V, v(r))$$

(wobei $z^2 + p^2 = r^2$). Da $\sigma^I(V)$ konstante Projektilgeschwindigkeit voraussetzt, schreiben wir die BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit in gleicher Näherung:

$$w^I(p) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho(r) \mathcal{G}_{BEA}(V, v(r)).$$

Die notwendige Bedingung für $v(r)$ ist dann:

$$\sigma^I(V) = \int_0^\infty 2\pi p dp \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho(r) \mathcal{G}_{BEA}(V, v(r))$$

d.h. einfach:

$$\rho(r) = \frac{dv}{dr} \frac{v^2}{r^2} \tilde{\rho}(v(r))$$

Ein Verfahren ist es nun, die Orts- bzw. Geschwindigkeitsverteilung $\rho(r)$ und $\tilde{\rho}(v)$ des K-Elektrons durch das quantenmechanische Resultat vorzugeben und $v(r)$ mit der Randbedingung $v(0) = \infty$ zu berechnen ^{/63/}. Abbildung 26 zeigt das Ergebnis für wasserstoffartige Zustände. Zugleich ist hier die klassische lokale Geschwindigkeit eines im Coulomb-Feld $-Z_2 e^2/r^2$ gebundenen Elektrons dargestellt, dessen kinetische und potentielle Energie im zeitlichen Mittel $\frac{1}{2} m_e v_K^2$ und $-Z_2 e^2/a_K$ betragen (Energiesatz und Virialtheorem ergeben:

$$v(r) = v_K \sqrt{(2 a_K/r) - 1} \quad).$$

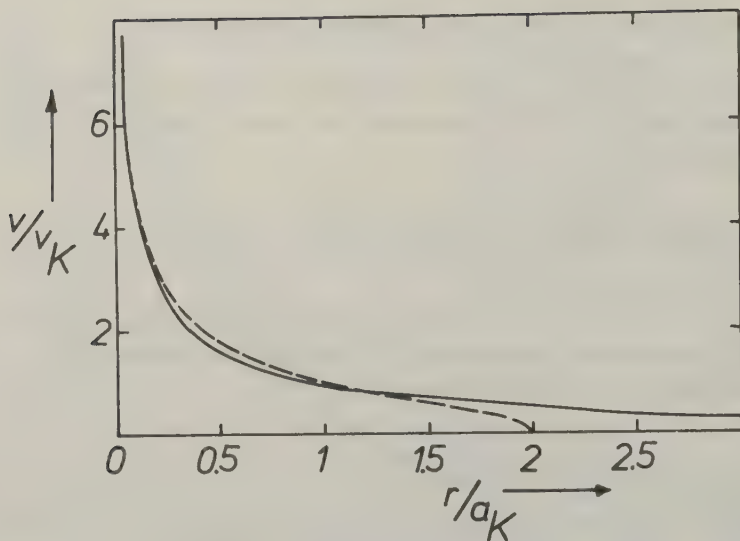


Abb. 26: Effektive Geschwindigkeit am Ort r und (gestrichelt) klassische lokale Geschwindigkeit des K -Elektrons

In verschiedenen Arbeiten /64,65/ wird von dieser klassischen Beziehung ausgegangen. Entweder kann dann die oben angegebene Transformationsrelation $\tilde{\rho}(v) \rightarrow \rho(r)$ erfüllt werden, ohne daß $\rho(r)$ die quantenmechanische Elektronendichte wiedergibt, oder umgekehrt. Im ersten Fall ist

$$w^I(p)|_0 = 2 \int_0^{\sqrt{4a_K^2 - p^2}} dz \frac{\sqrt{(2a_K/R)-1}}{\pi^2 a_K^3} \phi_{BEA}(V, v_K \cdot \sqrt{(2a_K/R)-1})$$

(der Index ϕ deutet an, daß hier die Bedingung $\int_0^\infty 2\pi p w^I(p) dp = \phi^I$ erfüllt ist), im zweiten Fall ergibt sich

$$w^I(p)|_\phi = 2 \int_0^{\sqrt{4a_K^2 - p^2}} dz \frac{2e}{\pi a_K^3} e^{-(2R/a_K)} \phi_{BEA}(V, v_K \cdot \sqrt{(2a_K/R)-1}).$$

In Abbildung 27 werden BEA-Ionisationswahrscheinlichkeiten in den drei angeführten Alternativen mit den SCA-Ergebnissen von Abbildung 22 und 24 verglichen. Insbesondere die Methode, bei der sowohl die quantenmechanische Elektronendichte verwendet wird als auch die Integration des differentiellen Ionisationsquerschnitts tatsächlich auf den integralen BEA-Ionisationsquerschnitt führt, erbringt gute Übereinstimmung mit der SCA (in der Zeichnung sind die entsprechenden Kurven mit $BEA_{S, \delta}$ bezeichnet). Die $w^I(p)|_S$ -Kurven weichen für Stoßparameter $p \lesssim a_K$ ebenfalls nur geringfügig vom SCA-Ergebnis ab. Für die $w^I(p)|_\delta$ -Kurven dagegen treten auch bei kleineren Stoßparametern deutliche Abweichungen auf.

Mit dem $BEA_{S, \delta}$ -Konzept steht also zumindest ein Verfahren zur Verfügung, das es bei drastisch reduziertem Rechenaufwand erlaubt, SCA-Ionisationswahrscheinlichkeiten in guter Näherung zu reproduzieren. Alle folgenden BEA-Rechnungen beschränken sich auf dieses Konzept.

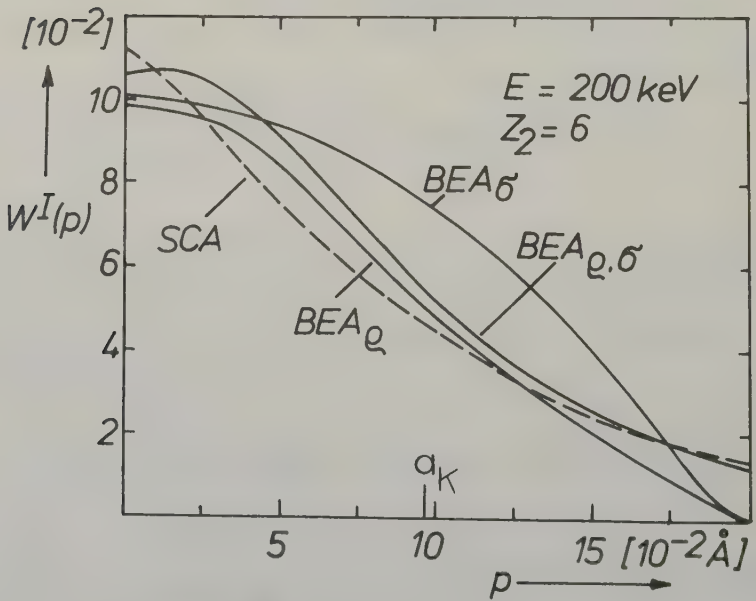
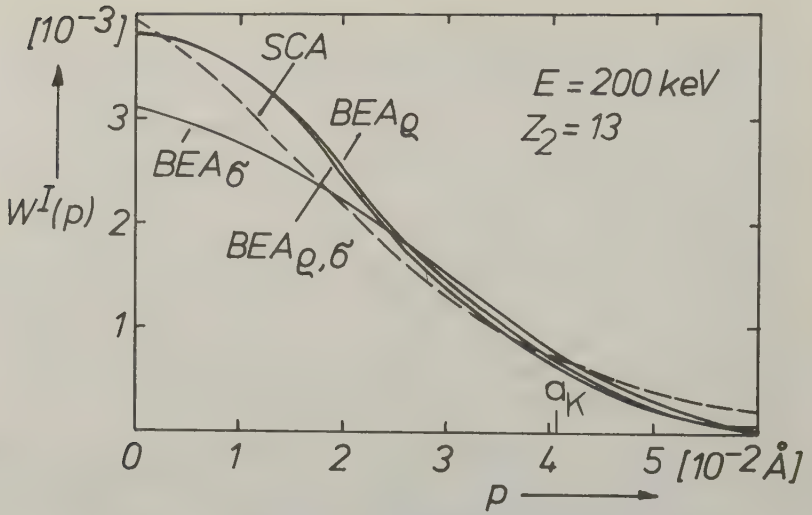


Abb. 27: Vergleich von BEA- und SCA-Ionisationswahrscheinlichkeiten

7. Vergleich theoretischer und experimenteller Ionisationswahrscheinlichkeiten

7.1. K-Ionisation von Aluminium

7.1.1. Datenvergleich

In Abbildung 28 ist die experimentelle Stoßparameterabhängigkeit der Wahrscheinlichkeit für Ionisation der K-Schale von Aluminium durch 200 keV-Protonen den Ergebnissen der SCA- und BEA-Rechnungen gegenübergestellt. Abbildung 29 zeigt einen äquivalenten Vergleich für die Energieabhängigkeit der K-Ionisationswahrscheinlichkeit bei festem Streuwinkel ($\theta = 3^\circ$). Beide Abbildungen decken deutliche Diskrepanzen zwischen experimentellen und theoretischen Ergebnissen auf: die theoretischen Kurven liegen zu hoch, im allgemeinen um mehr als einen Faktor 2. Die theoretische Beschreibung ist in der bisherigen Näherung also nicht ausreichend. Die Näherung soll deshalb in zweifacher Hinsicht modifiziert werden: einmal soll die Projektilbewegung realistischer beschrieben werden als es in der Näherung konstanter Projektilgeschwindigkeit der Fall ist, insbesondere aber sollen Korrekturen eingeführt werden, die Abweichungen auf Grund der ungenügenden Erfüllung des Kriteriums $(Z_1/Z_2) \ll 1$ (im Sinne von Abbildung 1) Rechnung tragen.

Um systematische Überhöhungen des PWBA-Ionisationsquerschnitts gegenüber experimentellen Daten zu kleinen V/v_K hin zu klären, haben Bang und Hansteen ^{/7/} die Näherung gerader Projektilbahnen in der SCA, deren integraler Ionisationsquerschnitt identisch ist mit dem PWBA-Ionisationsquerschnitt ^{/12/}, mit SCA-Rechnungen verglichen, die hyperbolische Projektilbahnen zugrundeliegen. Ihre Ergebnisse sind jedoch nur für den stark adiabatischen Fall $(V/v_K) \ll 1$ gültig. Der Einfluß der Abstoßung und Retardierung des Projektils im Coulomb-Feld des Targetkerns läßt sich für die SCA-Methode jedoch in einer Näherung abschätzen, die gegenüber dem Verfahren von 6.2. nur Änderungen in den Werten der Eingabeparameter des Computerprogrammes erforderlich macht (siehe 7.1.2.). Im Rahmen der BEA läßt sich

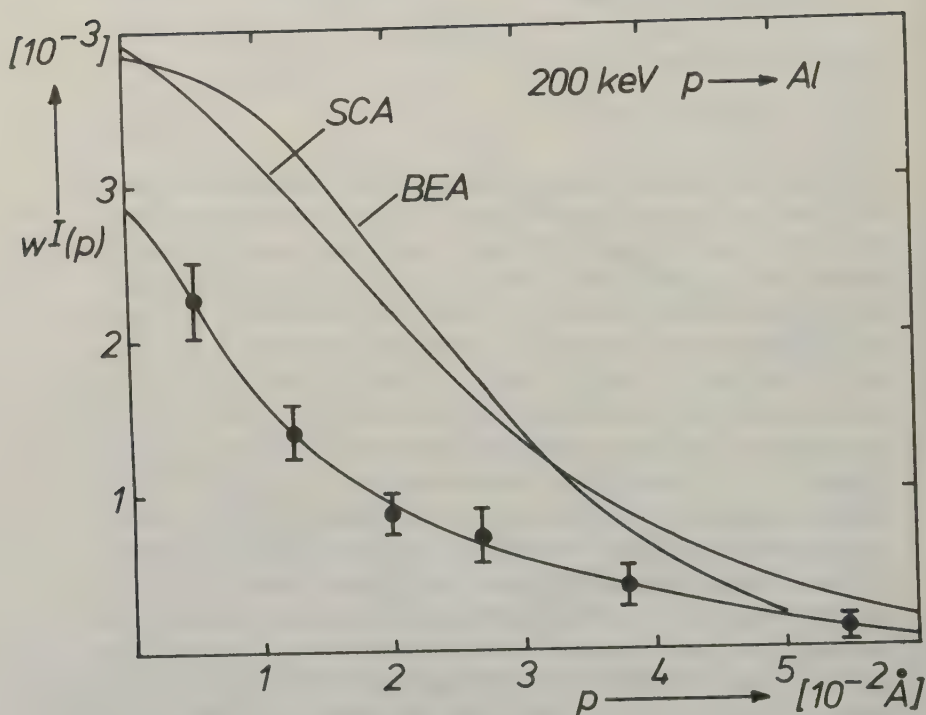


Abb. 28: Vergleich der experimentellen Stoßparameterabhängigkeit der K-Ionisationswahrscheinlichkeit von Aluminium mit dem SCA- und BEA-Ergebnis

die korrekte klassische Projektilbewegung berücksichtigen.

Für $(Z_1/Z_2) \ll 1$ verliert die Projektil-Target-Wechselwirkung den Charakter einer kleinen Störung. Der formale Schritt zur Verbesserung der in Störungstheorie erster Ordnung berechneten SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit wäre deshalb der Übergang zur Störungsrechnung höherer Ordnung. Der Aufwand solcher Rechnungen wurde jedoch bisher vermieden (eine Aus-

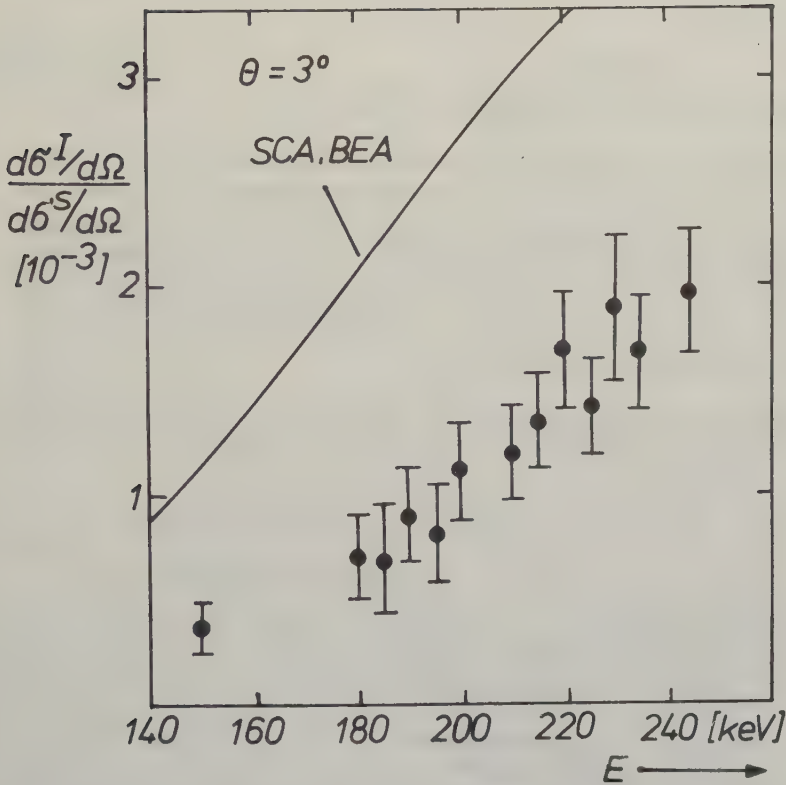


Abb. 29: Experimentelle und theoretische K-Ionisationswahrscheinlichkeit von Aluminium für konstanten Streuwinkel als Funktion der Protonenenergie

nahme bildet eine in diesem Jahr erschienene Arbeit^{/73/}, die jedoch nur numerische Ergebnisse für integrale Ionisationsquerschnitte anbietet) und statt dessen ein mehr phänomenologisches Vorgehen gewählt. Brandt, Laubert und Sellin^{/12/} weisen in diesem Sinne auf eine effektive Erhöhung der Bindungsenergie des K-Elektrons durch das in die K-Schale eingedrungene Projektil hin, die zu einer Reduzierung der Ioni-

sationswahrscheinlichkeit führt. In 7.1.3. wird dieser Effekt diskutiert.

7.1.2. Coulomb-Abstoßung und -Retardierung

Die Berücksichtigung des Effekts der Abstoßung und Retardierung des Projektils im Coulomb-Feld des Targetkerns läßt sich für die SCA unter Beibehaltung einer Näherung konstanter Projektilgeschwindigkeit dadurch erreichen, daß der Stoßparameter p durch einen größeren effektiven Stoßparameter p' und die Projektilgeschwindigkeit V durch eine kleinere effektive Geschwindigkeit V' ersetzt wird.

Im BEA-Konzept dagegen kann mit der korrekten klassischen Projektilbewegung gerechnet werden, es ist dann:

$$\frac{dw^I}{dz} = \left(1 + \frac{d^2 z^2}{p^2(p^2 + z^2)}\right)^{1/2} \rho(R) \phi_{BEA}(V(R), v(R)) ,$$

z ist hier die Projektion der Projektilkoordinate R auf eine Ebene senkrecht zur Symmetralen der Projektilbahn, d ist der halbe Stoßdurchmesser, für $R(z)$ gilt:

$$R^2(z) = \left(\sqrt{p^2 + d^2} + \frac{d}{p} \sqrt{p^2 + z^2} \right)^2 + z^2$$

und $V(R)$ ist:

$$V(R) = V_\infty \sqrt{1 - 2d/R} .$$

In Abbildung 30 ist (dw^I/dz) als Funktion von z für einen kleinen Stoßparameter ($p = 0.1 a_K$) dargestellt. Das Bild zeigt, daß die größten Beiträge zur Ionisationswahrscheinlichkeit aus dem Bereich der Bahnkurve bei $z = 0$ kommen und daß gerade für kleine Stoßparameter, wo Bahnkrümmung und Retardierung am wirksamsten werden, die Verteilung dw^I/dz für zunehmende Entfernung von diesem Bereich stark abfällt. Als Effektivwerte für den Stoßparameter p' und die Projektilgeschwindigkeit V' der korrigierten SCA-Rechnung kann deshalb in erster Näherung $p' = R(0)$ und $V' = V(0)$ gesetzt werden^{/68,74/}.

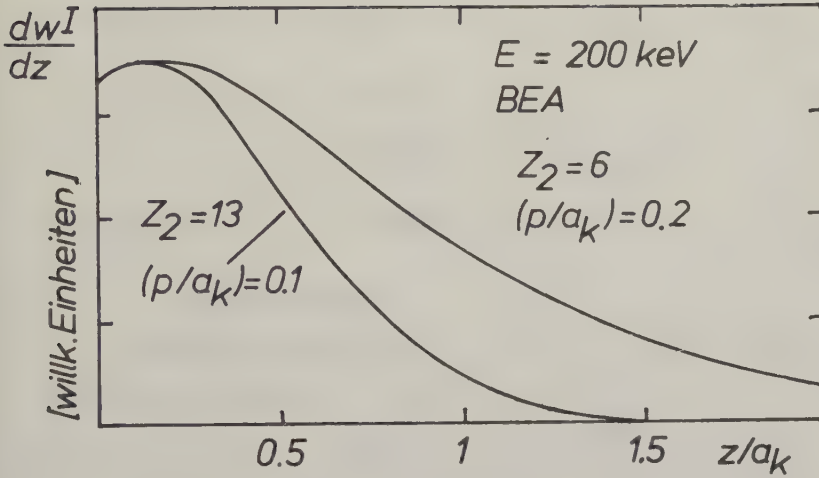


Abb. 30: Verteilung der BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit in der Pfadkoordinate z .

Das Ergebnis der Korrekturen zeigt für die SCA Abbildung 31 und für die BEA Abbildung 32. Gemessen an der Diskrepanz der experimentellen Werte ist der Korrektoreffekt bei großen Stoßparametern gering. Bei kleinen Stoßparametern wird die korrigierte SCA-Kurve zwar in die Nähe der experimentellen Kurve abgebogen, die weitaus geringere Reduzierung der BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit in diesem Bereich läßt dies jedoch als Überbewertung durch das Näherungsverfahren erscheinen.

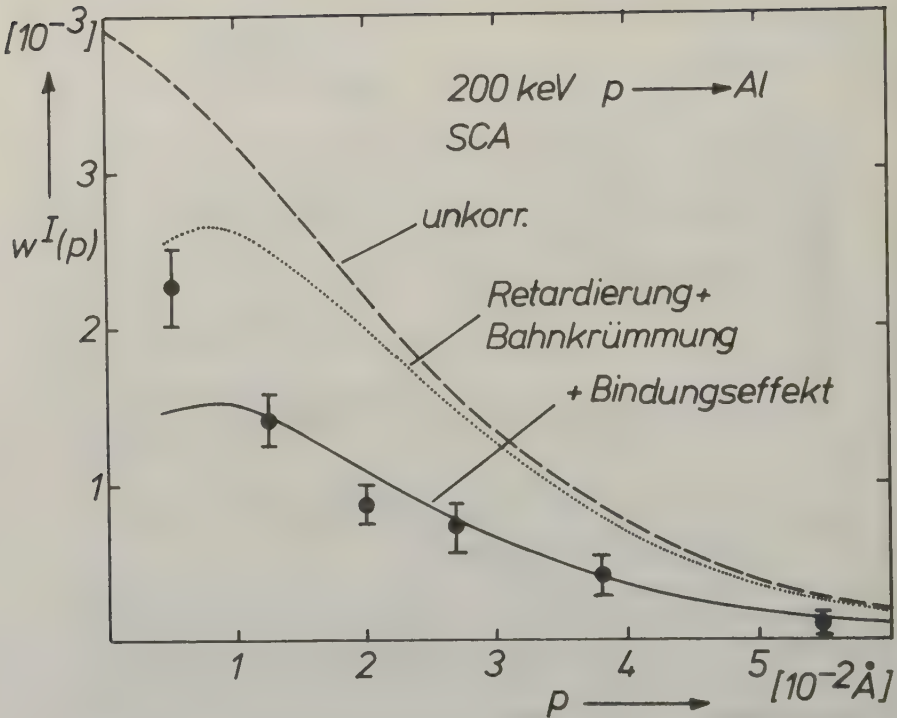


Abb. 31: Effekt der Korrekturverfahren auf die Stoßparameterverteilung der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit

7.1.3. Bindungseffekt

Die Vorstellung, die der von Brandt und Mitarbeitern^{/12/} eingeführten Bindungskorrektur zugrunde liegt, ist die einer adiabatischen ($V/v_K \ll 1$) Anpassung der atomaren Elektronenzustände an die Anwesenheit des Projektils. Anfangs- und Endzustand des K-Elektrons sollten als Zustände eines Quasimoleküls aus Targetatom und Projektil betrachtet werden, das sich kontinuierlich mit dem internuklearen Abstand R

ändert. Entsprechend der Behandlung des Projektilpotentials als statische Störung erster Ordnung beschränkt sich die Brandtsche Korrektur auf eine Erhöhung der K-Bindungsenergie. Wir verwenden ein Verfahren, das auch eine Relaxation der Wellenfunktionen φ_i und φ_f berücksichtigt^{/19/}. Unter der Voraussetzung $R \ll a_K = (1/\alpha)$ können wasserstoffartige Wellenfunktionen als Näherung dienen: wir ermitteln α und ε_K jeweils als Funktion des internuklearen Abstandes R .

Der BEA-Ansatz für die Ionisationswahrscheinlichkeit modifiziert sich dann zu:

$$w^I(p) = \int ds \rho^*(\alpha(R), R) \int_{\varepsilon_K(R)}^E d\Delta E \frac{d\sigma_{BEA}(V(R), v^*(\alpha(R), R))}{d\Delta E}$$

Dabei ist $\rho^*(\alpha(R), R) = (\alpha^3(R)/\pi) e^{-2\alpha(R) \cdot R}$. Ferner ist berücksichtigt, daß sich $v(R)$ durch die universelle Funktion $v^*(\alpha R)$ ausdrücken läßt.

Für die SCA wird die entsprechende Korrektur näherungsweise durch Verwendung von $\varepsilon_K(p')$ und $\alpha(p')$ in den Eingabeparametern des Rechenprogramms erreicht.

Das Verfahren zur Ermittlung der Abhängigkeiten $\varepsilon_K(R)$ und $\alpha(R)$ ist eine Ritzsche Optimierung $\delta \langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_i \rangle = 0$ mit den adiabatischen Wellenfunktionen des K-Elektrons

$\varphi_i(\alpha(R), r) = (\alpha^3(R)/\pi)^{1/2} e^{-\alpha(R)r}$ nach dem Parameter $\alpha(R)$. Der Hamilton-Operator des K-Elektrons im Zweizentren-Potential von Targetkern und Projektil ist (für $Z_1=1$)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - \frac{(Z_2 - 0.3)e_0^2}{r} - \frac{e_0^2}{|\vec{R} - \vec{r}|} + V_s(R, Z_2)$$

Die Abschirmenergie $V_s(R, Z_2)$ der äußeren Elektronen für die K-Schale (siehe 6.2.) muß hier zunächst ebenfalls als Funktion des internuklearen Abstandes angesetzt werden. V_s ist von beträchtlichem Einfluß auf die Bindungsenergie und soll deshalb zunächst diskutiert werden.

Eine R-Abhängigkeit der Konfiguration der äußeren Elektronen könnte einmal direkt durch das Coulomb-Feld des Projektils bewirkt werden, zum anderen über die R-Abhängigkeit der K-Elektronenverteilung ins Spiel kommen. Da die internuklearen Abstände, die für die Ionisation wesentlich sind, klein gegen den Erwartungswert des Abstandes der äußeren Elektronen vom Kern sind, erscheint für diese das Feld von Atomkern und Proton als Monopolfeld. Um den Einfluß der K-Schalenrelaxation $\alpha(R)$ auf den Abschirmterm abzuschätzen schreiben wir diesen als Energieaufwand, der nötig ist, um gegen das Feld der äußeren Elektronen ein Elektron aus dem Unendlichen auf den K-Schalenradius zu bringen:

$$V_S = \int_{1/\alpha}^{\infty} \frac{4\pi r^2 dr e_o^2 \rho(r)}{r}$$

Die Poissongleichung ergibt dann unter Verwendung des Molière-Potentials:

$$V_S(\alpha) = - \int_{1/\alpha}^{\infty} dr r \nabla^2 V(r) = \frac{Z_2 e_o^2}{a_{TF}} \left(0.6 e^{-\frac{6}{\alpha a_{TF}}} + 0.66 e^{-\frac{1.2}{\alpha a_{TF}}} + 0.105 e^{-\frac{0.3}{\alpha a_{TF}}} \right)$$

Das Al-Atom wird durch die Anwesenheit des Protons in seiner K-Schale praktisch übergeführt in ein Si^+ -Ion (das, wie aus Hartree-Fock-Rechnungen bekannt ist, bezüglich seines Abschirmverhaltens weitgehend mit dem Siliziumatom indentifiziert werden darf^{/75/}). Eine Änderung des K-Schalenradius vom unrelaxierten Fall (K-Schale von Aluminium) auf den voll relaxierten Fall (K-Schale von Silizium) bringt für die zugehörigen Abschirmwerte $V_S(Al)$ und $V_S(Si)$ nur einen Unterschied von ca. 3 %. Wir setzen deshalb V_S als unabhängig von R an. Der Wert dieser Abschirmkonstanten läßt sich jedoch nicht eindeutig festlegen. Da die Projektilgeschwindigkeit durchaus von der Größe der mittleren Elektronengeschwindigkeiten in den äußeren Schalen ist, kann die adiabatische Näherung auf die äußeren Elektronenschalen nicht angewandt werden. Wir stecken den Spielraum der Möglichkeiten durch die Extremfälle völlig unrelaxierter Schalen und vollständig relaxierter äußerer Schalen ab:

$$V_s^{\text{unrelax.}} = (Z_2 - 0.3)^2 R_y - \epsilon_K(Z_2) \quad \text{und}$$

$$V_s^{\text{relax.}} = (Z_2 + 1 - 0.3)^2 R_y - \epsilon_K(Z_2 + 1).$$

Die Ritzsche Variation wird nun mit konstantem Abschirmterm durchgeführt. Definieren wir als Relaxationsverhältnis des K-Schalenradius die Größe $\zeta = \alpha(R) a_K$ und als Maß für den internuklearen Abstand $y = R/a_K$ so ergibt sich:

$$\zeta = 1 + \frac{e^{-2\zeta y}}{Z_2 - 0.3} (1 + 2\zeta y).$$

Als R-Abhängigkeit der Bindungsenergie erhält man:

$$\epsilon_K(y) = (Z_2 - 0.3) R_y \zeta (2 - \zeta) + 2 (Z_2 - 0.3) \frac{R_y}{y} [1 - (1 + \zeta y) e^{-2\zeta y}] - V_s(Z_2)$$

Für V_s werden die Werte

$$V_s^{\text{unrelax.}} = 633.6 \text{ eV} \quad \text{und}$$

$$V_s^{\text{rel.}} = 701.7 \text{ eV} \quad \text{verwendet } /69,70/.$$

In Abbildung 32 werden vollständig korrigierte Stoßparameterverteilungen der BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit den experimentellen Punkten gegenübergestellt. Neben den Ergebnissen, die den gerade diskutierten Fällen relaxierter und unrelaxierter äußerer Elektronenschalen bei relaxierter K-Schale entsprechen, ist das Ergebnis der Brandtschen Korrektur eingezeichnet, die auch für die K-Schale keine Relaxation vorsieht ($\zeta = 1$ und $V_s = V_s^{\text{unrelax.}}$). Es wird deutlich, daß alle drei alternativen Korrekturen die Diskrepanz zwischen theoretischen und experimentellen Werten weitgehend beseitigen. Abweichungen bei Stoßparametern $p \lesssim a_K$ ($a_K = 4.2 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$) können als systematische Fehler der BEA oder auch als Folge der Verletzung der Voraussetzung $R \ll a_K$, die der Behandlung

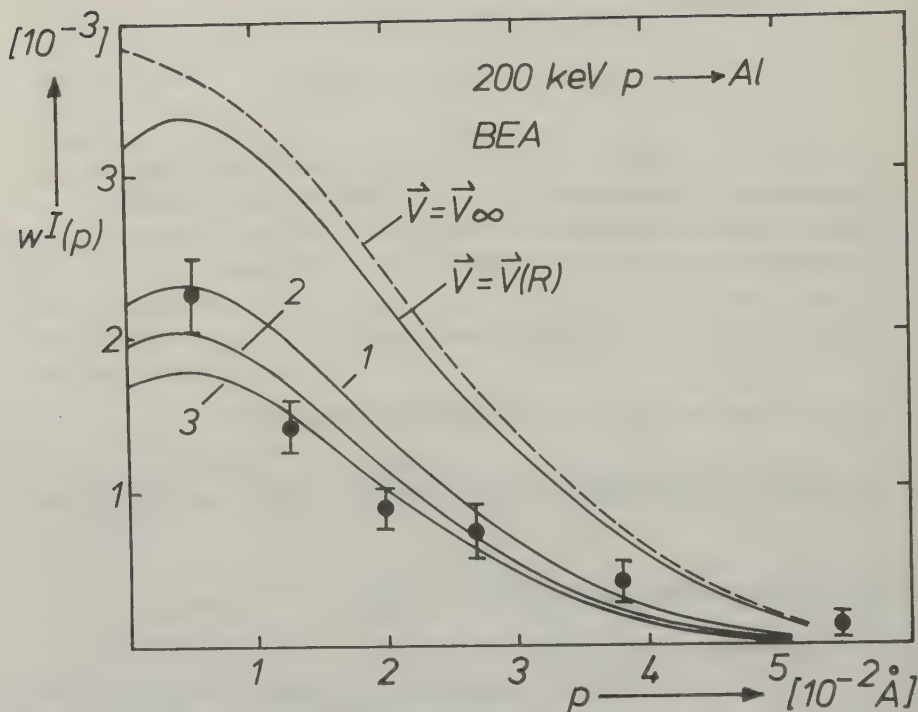


Abb. 32: Korrekturen der BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit. Die vollständig korrigierten Kurven 1-3 entsprechen den Fällen: (1) = Relaxation aller Elektronenschalen, (2) = Relaxation nur der K-Schale, (3) = keine Relaxation.

des Bindungseffekts zugrunde liegt, gedeutet werden. Bei Stoßparametern $p \lesssim a_K$ erreichen die unter der Annahme unrelaxierter äußerer Schalen berechneten Kurven die beste Annäherung an die Meßpunkte. Dies bestätigt sich auch für die in Abbildung 33 wiedergegebenen vollständig korrigierten Kurven für die Energieabhängigkeit der BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit bei konstantem Streuwinkel.

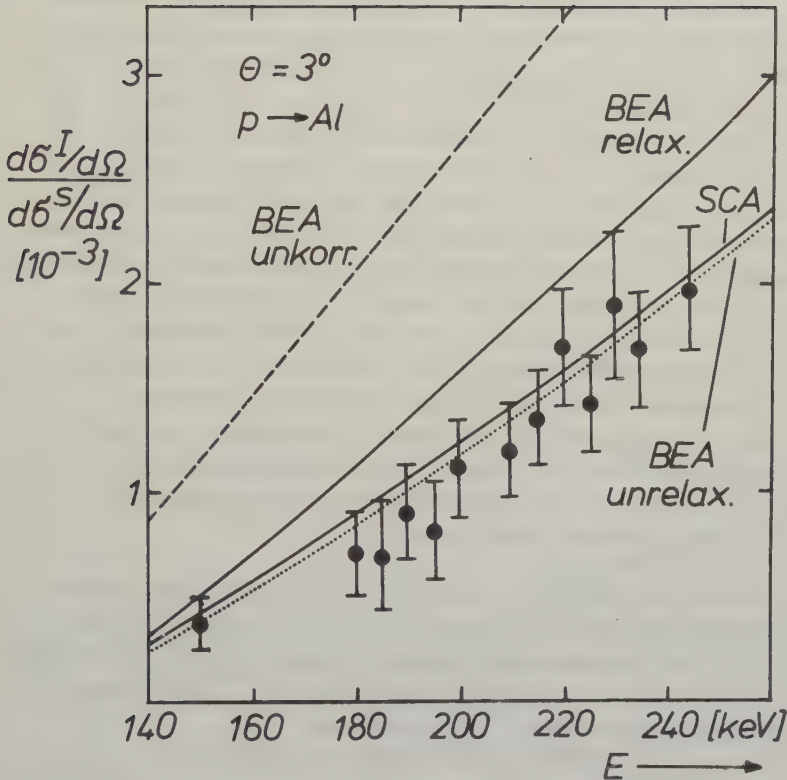


Abb. 33: Vollständig korrigierte Kurven für die Energieabhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit bei konstantem Streuwinkel.

Im SCA-Konzept führt die Berücksichtigung des Bindungseffekts ebenfalls zu guter Übereinstimmung der theoretischen und der experimentellen Kurven, wie die Abbildungen 31 und 33 zeigen. Die vollständig korrigierten SCA-Ionisationswahrscheinlichkeiten sind dabei für den Fall relaxierter Elektronenschalen berechnet. Die Stoßparameterverteilung der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit (Abbildung 31) weist die im BEA-Ergebnis bei großen Stoßparametern festgestellte Abweichung vom experimentellen Ergebnis nicht auf. Dagegen ergibt die SCA-

Rechnung zu geringe Werte bei kleinen Stoßparametern. Um zu prüfen, inwieweit dies als systematischer Fehler der Näherung ($V = V'$, $p = p'$, $E_K = E_K(p')$, $\alpha = \alpha(p')$) gelten kann, verwenden wir die BEA für einen Vergleich dieser Näherung mit dem korrekten Verfahren ($V = V(R)$, $E_K = E_K(R)$, $\alpha = \alpha(R)$). Das Ergebnis ist in Abbildung 34 dargestellt. Die Kurve für das Näherungsverfahren liegt gegenüber dem Ergebnis der korrekten Rechnung in einem Maße niedriger, das die Abweichungen der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit von der experimentellen Ionisationswahrscheinlichkeit großteils als Effekt des Näherungsverfahrens erscheinen läßt. Da bei mittleren und großen Stoßparametern der systematische Fehler der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit etwa dem Unterschied in den BEA-Kurven für relaxierte und unrelaxierte äußere Elektronenschalen gleichkommt (Abbildung 32), kann die in Abbildung 31 angegebene vollständig korrigierte SCA-Kurve als frei von dem systematischen Fehler der Näherung betrachtet werden, wenn sie dem Fall unrelaxierter äußerer Schalen zugeschrieben wird.

Um zu prüfen, inwieweit die experimentelle Stoßparameterverteilung der Ionisationswahrscheinlichkeit und die theoretischen $w^I(p)$ -Kurven konsistent sind mit dem integralen Ionisationsquerschnitt, vergleichen wir jeweils das Integral $\int_0^{p_{\max}} 2\pi p w^I(p) dp$ mit dem direkt gemessenen Ionisationsquerschnitt σ_{exp}^I . Der Stoßparameterbereich der Messungen $p \geq p_{\max} \approx 6 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$ sollte dabei als Integrationsintervall ausreichen. Dies wird dadurch plausibel, daß die Integration des unkorrigierten differentiellen SCA-Ionisationsquerschnitts mit $\int_0^{p_{\max}} d\sigma_{\text{SCA}}^I = 1.1 \text{ kb}$ einen Wert ergibt, der nur um 14 % niedriger liegt als der PWBA-Ionisationsquerschnitt $\sigma_{\text{PWBA}}^I = 1.29 \text{ kb}$. Die Ergebnisse der Integration sind: $\int d\sigma_{\text{exp}}^I = 530 \text{ b}$ für die experimentelle Kurve, $\int d\sigma_{\text{SCA}}^I |_{\text{korr.}} = 540 \text{ b}$ für die vollständig korrigierte SCA sowie $\int d\sigma_{\text{BEA}}^I |_{\text{relax.}} = 520 \text{ b}$, $\int d\sigma_{\text{BEA}}^I |_{\text{unrelax}} = 415 \text{ b}$ und $\int d\sigma_{\text{BEA}}^I |_{\xi=1} = 380 \text{ b}$ für die BEA in den drei Alternativen bezüglich der Relaxierung der Elektronenschalen. Demgegenüber steht ein direkt gemessener (zum Verfahren siehe 2.3.) Ionisationsquerschnitt von $\sigma_{\text{exp}}^I = 600 \text{ b} \pm 15 \%$,

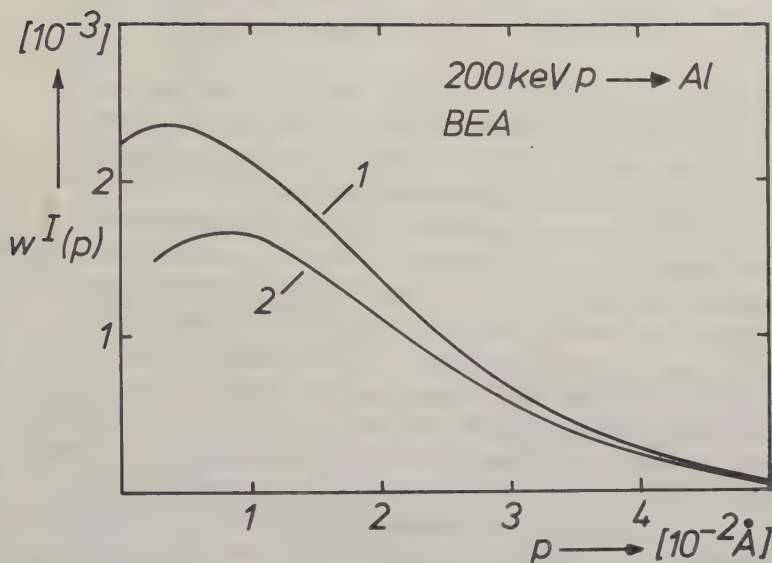


Abb. 34: Vollständig korrigierte Stoßparameterverteilung der BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit

(1) $V = V(R)$, $E_K = E_K(R)$, $\alpha = \alpha(R)$

(2) $V = V^i$, $p = p'$, $E_K = E_K(p')$, $\alpha = \alpha(p')$

ein Vergleichswert aus der Literatur ^{/13/} ist $470 \pm 25 \%$ (bei $\omega = 0.038$). Zunächst sei die gute Übereinstimmung von $\int d\phi_{\text{exp}}^I$ mit ϕ_{exp}^I festgestellt. Da die wesentlichen Beiträge zum Integral $\int d\phi_{\text{exp}}^I$ von Stoßparametern herrühren, die fühlbaren Korrekturen unterworfen wurden (vergleiche Abbildung 21) bestätigt diese Übereinstimmung insbesondere die Richtigkeit der getroffenen Korrekturmaßnahmen. Während die Integration des vollständig korrigierten differentiellen SCA-Ionisationsquerschnitts ebenfalls auf ein mit ϕ_{exp}^I gut übereinstimmendes Ergebnis führt, treten für die BEA zu niedrige Werte gerade in den Fällen auf, in denen die Stoßparameterverteilung der vollständig korrigierten BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit die

experimentelle Kurve insgesamt am besten wiedergibt. Dies bestätigt den Effekt zu niedriger $w^I(p)$ - Werte für die vollständig korrigierte BEA bei Stoßparametern $p \gtrsim a_K$.

Insgesamt läßt sich aus dem Vergleich theoretischer und experimenteller Daten für die Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit für protoneninduzierte K-Ionisation von Aluminium von Stoßparameter und Projektilenergie folgendes Ergebnis ableiten: Bei V/v_K um 0.25 wird eine befriedigende theoretische Beschreibung dadurch erreicht, daß im Rahmen der SCA und BEA die klassische Bewegung des Projektils korrekt berücksichtigt wird, insbesondere aber Korrekturen eingeführt werden, die einer adiabatischen Anpassung der Elektronenzustände der K-Schale an das Coulomb-Feld des Projektils Rechnung tragen. Die Korrekturen sind vorwiegend bestimmt durch die Erhöhung der Bindungsenergie der K-Elektronen. Die Alternative relaxierter oder unrelaxierter äußerer Schalen differenziert dieses Bild. Für den plausiblen Fall nichtrelaxierter äußerer Schalen wird dabei die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Punkten erzielt. Der Vergleich von SCA und BEA zeigt, daß die vollständig korrigierte SCA im gesamten Stoßparameterbereich der Messungen die experimentelle $w^I(p)$ - Kurve gut anzunähern vermag, die vollständig korrigierte BEA-Ionisationswahrscheinlichkeit jedoch, bei ebenfalls guter Übereinstimmung für Stoßparameter $p \lesssim a_K$, für Stoßparameter $p \gtrsim a_K$ erheblich unter die experimentellen Werte abfällt.

7.2 K-Schalen-Ionisation von Kohlenstoff

7.2.1. Gegenüberstellung der Daten

An Kohlenstoff wurde für Protonenenergien von 100 keV, 150 keV und 200 keV jeweils die Stoßparameterabhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit $w^I(p)$ bestimmt. Die Ergebnisse sind in Abb. 35 zusammengestellt.

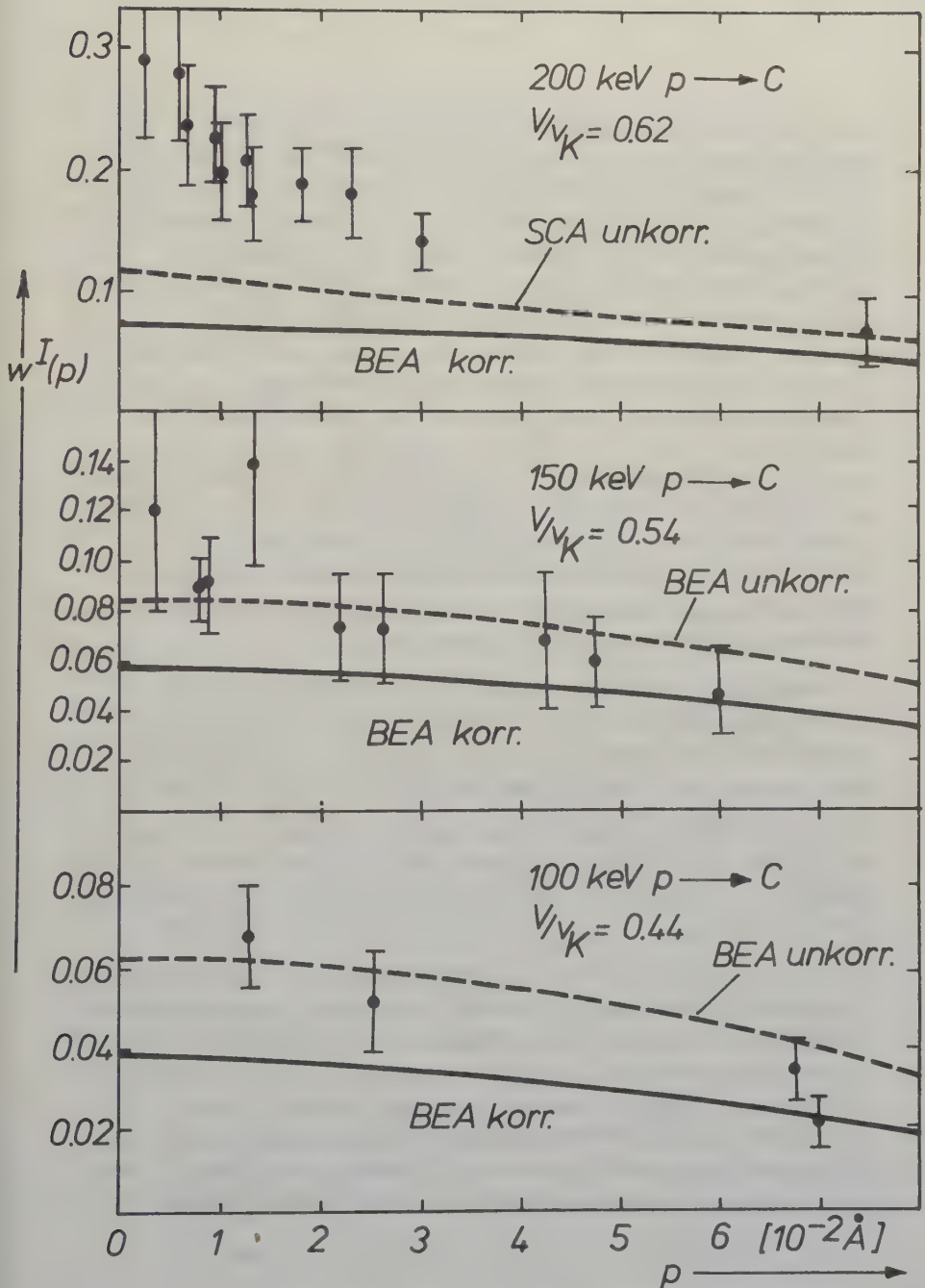


Abb. 35: Vergleich experimenteller und theoretischer Stoßparameterverteilungen der K-Ionisationswahrscheinlichkeit von Kohlenstoff.

Zur Ermittlung theoretischer Vergleichskurven wurde der bei Aluminium erprobte Korrekturmodus im Rahmen der BEA angewandt. Die Rechnungen berücksichtigen die korrekte klassische Projektilbewegung und schließen die in 7.1.3. erörterten Korrekturen für Wellenfunktion und Bindungsenergie der K-Schale ein. Als Abschirmungsenergie V_g wurde entsprechend dem Fall unrelaxierter Wellenfunktionen der äußeren Elektronen $V_g = 209$ eV gesetzt. Wegen des hohen Rechenzeitbedarfs wurde darauf verzichtet, äquivalente SCA-Rechnungen durchzuführen. Die gute Übereinstimmung der unkorrigierten BEA- und SCA-Kurven bei Kohlenstoff (vergl. Abb. 27) und die Erfahrungen bei Aluminium für Stoßparameter $p \lesssim a_K$ (vergl. Abb. 32 und 33) lassen es jedoch zu, die BEA-Ergebnisse als gute Näherungen gleichgradig korrigierter SCA-Rechnungen zu werten. Abb. 35 zeigt diese Ergebnisse in Form durchgezogener Kurven. Als Maß für die Auswirkung der Korrektur ist außerdem jeweils die unkorrigierte SCA/BEA-Kurve eingezeichnet.

Der Vergleich der Ergebnisse der Messungen mit denen der korrigierten SCA/BEA in Abbildung 35 zeigt bei großen Stoßparametern eine im Rahmen der Meßgenauigkeit liegende Übereinstimmung. Zu kleinen Stoßparametern hin liegen die experimentellen Punkte über den theoretischen Kurven, wobei die Abweichungen systematisch zunehmen. Eine weitere Tendenz ist eine Zunahme des Effekts mit wachsendem V/v_K . Die größte Abweichung wird für $(V/v_K) = 0.62$ mit etwa einem Faktor 4 erreicht.

Ein Vergleich des integrierten differentiellen Ionisationsquerschnitts mit dem direkt gemessenen integralen Ionisationsquerschnitt ist hier nicht durchführbar, da die wesentlichen Beiträge zum integralen Ionisationsquerschnitt von Stoßparametern kommen, die außerhalb des Bereichs der Messungen liegen. Insbesondere ist die starke Diskrepanz experimenteller und theoretischer Kurven bei kleinen Stoßparametern kein Effekt, der im integralen Ionisationsquerschnitt zum Ausdruck kommt.

In der Größenordnung vergleichbare Überausbeuteeffekte an gemessenen Ionisationswahrscheinlichkeiten der K-Schale aus der Anregung mit Protonen bei kleinen Stoßparametern - das Ergebnis wird mit $w^I(0)$ identifiziert - werden von Chemin und Mitarbeitern /77/ berichtet. Sie stellen in Messungen an Mg, Al, Si bei einer Protonenenergie von 1 MeV, (dies entspricht V/v_K -Werten um 0.6) ein Anwachsen dieser Überausbeuten mit V/v_K fest.

7.2.2. Sekundäreffekte

Bevor ein reines Ionisationsmodell zur Deutung der Meßkurven herangezogen wird, ist es angebracht, Sekundäreffekte zu diskutieren, die wegen der spezifischen Verhältnisse bei Kohlenstoff Einfluß auf die gemessene Röntgen-Emission nehmen könnten.

Eine Klasse solcher Effekte kann aus der Bremsstrahlung von Sekundärelektronen (Elektronen aus Stößen des Protons mit schwach gebundenen Elektronen, σ - und -Auger-Elektronen) erwachsen. Der maximale Energieübertrag $E_e^{\max}$ auf ein angenähert ruhendes Elektron ($E_e^{\max} = 2m_e v^2 = 440 \text{ eV}$ für 200 keV-Protonen) ist nicht mehr kleiner als die Röntgen-Energien $E_\gamma \pm \Delta E_\gamma/2 = 250 \text{ eV} \pm 5\%$, für die das Fenster des Röntgen-Detektors transparent ist (Abbildung 6). Ebenso reicht das Spektrum der σ -Elektronen bei Kohlenstoff zu beträchtlichen Anteilen über E_γ hinaus (Abbildung 25). Die Zahl der pro charakteristischem Röntgenquant emittierten Auger-Elektronen ist gegenüber Aluminium um eine Größenordnung erhöht. Es läßt sich jedoch zeigen, daß auch für Kohlenstoff diese sekundäre Bremsstrahlung vernachlässigt werden kann. Hinreichende Bedingungen dafür sind:

$$n_{SE} \langle d\delta_{\text{Brems}}(E_e)/dE_\gamma \rangle \Delta E_\gamma \ll \sigma^\gamma \cong 1 \text{ kb}$$

(für angestoßene Kontinuumslektronen)

$$\frac{\mu L}{A} \langle d\delta_{\text{Brems}}(E_e)/dE_\gamma \rangle \Delta E_\gamma \ll \omega \cong 2 \cdot 10^{-3}$$

(für Auger- und σ -Elektronen).

Dabei ist $d\sigma_{\text{Brems}}$ der differentielle Wirkungsquerschnitt für Elektron-Nukleon-Bremsstrahlung, n_{SE} die Anzahl (pro Proton) der Kontinuumselektronen, die eine Energie $> E_\gamma$ gewinnen. Die Mittelung $\langle d\sigma_{\text{Brems}}(E_e)/dE_\gamma \rangle$ hat über das Energiespektrum der jeweiligen Sekundärelektronen zu erfolgen. Als Näherung für $d\sigma_{\text{Brems}}/dE_\gamma$ unter den hier vorliegenden Bedingungen ($E_\gamma/E_e \ll 1$) kann ein von Jackson ^{76/} angegebener semiklassischer Wirkungsquerschnitt verwendet werden ^{78/}:

$$\frac{d\sigma_{\text{Brems}}(E_e)}{dE_\gamma} \Delta E_\gamma = \frac{\Delta E_\gamma}{E_\gamma} \frac{16}{3} \left(\frac{1}{137}\right)^3 Z_2^2 a_0^2 \frac{R_\gamma}{E_e} \ln(4E_e/E_\gamma)$$

$$\lesssim \frac{d\sigma_{\text{Brems}}(E_\gamma)}{dE_\gamma} \Delta E_\gamma \approx 15 b.$$

(Hier sei angefügt, daß sich demgegenüber der entsprechende Wirkungsquerschnitt für protoneninduzierte Bremsstrahlung größenordnungsmäßig um einen Faktor $(m_e/M)^2 = 3 \cdot 10^{-7}$ reduziert). Für n_{SE} erhält man:

$$n_{\text{SE}} = \frac{4\mu L}{A} \int_{E_\gamma}^{E_e^{\text{max}}} \frac{d\sigma_{\text{BEA}}}{d\Delta E} d\Delta E = \frac{4\mu L}{A} \frac{\pi e_0^4 M}{m_e} \left(\frac{1}{E_\gamma} - \frac{1}{E_e^{\text{max}}} \right).$$

Wir erhalten damit für 200 keV Protonen und $(\mu L/A) = 40 \text{ \AA}^{-2}$:

$$n_{\text{SE}} \langle d\sigma_{\text{Brems}}/dE_\gamma \rangle \Delta E_\gamma \lesssim 25 b \quad (\ll 1 \text{ kb})$$

$$\text{und } \frac{\mu L}{A} \langle d\sigma_{\text{Brems}}/dE_\gamma \rangle \Delta E_\gamma \lesssim 6 \cdot 10^{-6} \quad (\ll 2 \cdot 10^{-3}).$$

Eine weitere Kategorie von Sekundäreffekten, die bei Koinzidenzstreuexperimenten von Bedeutung sein können, sind Rückstoßeffekte. Zunächst könnte dabei an den Effekt sekundärer Ionisation der K-Schale gedacht werden. Rückstoßeffekte dieser Art sind aus Schwerionenexperimenten bekannt ^{79/}. In diesem Experiment reichen jedoch die übertragenen Energien für K-Schalen-Ionisation nicht aus. Dies wird aus Abbildung 36 deutlich, wo die Rückstoßenergie ΔE_{el} als Funktion des Stoßparameters für Protonenenergien 100 keV und 200 keV dargestellt ist. Im Stoßparameterbereich dieser Messungen bleibt ΔE_{el} (mit Ausnahme eines Meßpunktes) unter der K-Schalen-Ionisationsenergie des Kohlenstoffs.

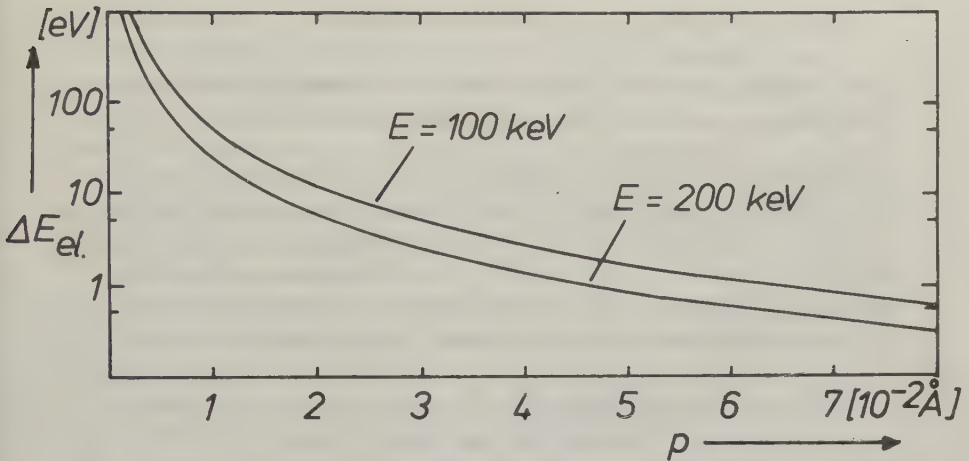


Abb. 36: Rückstoßenergie der Kohlenstoffatome als Funktion des Stoßparameters

Nicht ausschließen lassen sich dagegen Einflüsse des Rückstoßes auf den Ionisierungszustand der L-Schale. Wie in 5.2. diskutiert wurde, hängt die experimentell bestimmte Fluoreszenzausbeute vom Grad der Mehrfachionisierung ab. Dies ergibt solange keinen Fehler bei der Bestimmung der Ionisationswahrscheinlichkeit solange der Grad der Mehrfachionisierung nicht vom Stoßparameter abhängt (siehe 2.3.). Eine Stoßparameterabhängigkeit der gemessenen Fluoreszenzausbeute würde jedoch in den gemessenen Ionisationswahrscheinlichkeiten zum Ausdruck kommen und zwar in dem Maße, in dem die stoßparameterspezifische Fluoreszenzausbeute von deren Mittelwert abweicht. Eine Vergrößerung des Meßwertes für die Emissionswahrscheinlichkeit und damit für die Ionisationswahrscheinlichkeit würde nach den in 5.1. gesammelten Erfahrungen bei Verringerung des Mehrfachionisationsgrades eintreten. Nun sind die Rückstoßenergien (typisch $\Delta E_{el.} = 100 \text{ eV}$) ausreichend, um Kohlenstoffatome im Gitter des Targets frei zu setzen und Stöße herbeizuführen, in denen eine Elektroneneinfangreaktion in die L-Schale und damit eine Verringerung der Mehrfachionisierung möglich ist. Wir betrachten also eine Reaktion vom Typ:



(die Symbole in den Klammern geben die Elektronenlochkonfigurationen nach der in 5.2 eingeführten Konvention an).

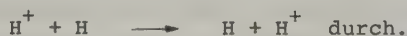
Der Prozeß wird dann von Bedeutung sein, wenn die mittlere Zeit, die bis zum Einsetzen der Reaktion verstreicht, kleiner ist als die Lebensdauer des K-Schalenloches, die mit 10^{-14} s anzusetzen ist ^{/80/}. Ist $\sigma^{\text{Einf.}}$ der Wirkungsquerschnitt des Einfangprozesses, v_R die Geschwindigkeit des Rückstoßatoms, N die Anzahldichte der Targetatome, so muß gelten:

$$\frac{1}{N v_R \sigma^{\text{Einf.}}} \lesssim 10^{-14} \text{ s.}$$

Für Rückstoßenergien der Größenordnung 100 eV ergibt dies die Forderung

$$\sigma^{\text{Einf.}} \gtrsim 1 \text{ \AA}^2.$$

Nun ist die Situation des diskutierten Einfangprozesses sicher zu komplex (insbesondere auch wegen Festkörpereffekten), um mehr als eine Plausibilität für die Erfüllung dieser Bedingung aufzeigen zu können. Wir führen eine Ähnlichkeitsbetrachtung mit dem Prozeß



Die Rydbergenergie ist grob vergleichbar mit der Bindungsenergie von L-Elektronen im Kohlenstoff. Bei einer Projektilgeschwindigkeit wie sie das Rückstoßatom aufweist, ist der experimentell bestimmte Wirkungsquerschnitt für Elektroneneinfang im Proton-Wasserstoff-Stoß ^{/81/}

$$\sigma^{\text{Einf.}} \approx 30 \text{ \AA}^2.$$

Dieser außerordentlich hohe Wert läßt einen Wirkungsquerschnitt für den Elektroneneinfang in Rückstoßatome $\gtrsim 1 \text{ \AA}^2$ nicht unrealistisch erscheinen.

Die gemessene Fluoreszenzausbeute und damit die Ionisationswahrscheinlichkeit sollte unter den hier vorliegenden experimentellen Bedingungen mit zunehmender Rückstoßenergie anwachsen. Nach Abbildung 36 bedeutet dies eine Zunahme zu kleineren Stoßparametern hin und als schwächere Abhängigkeit zu kleineren Protonenenergien hin. Für kleinere Protonenenergien sollte der Effekt zudem auf Grund höherer Mehrfachionisierung (vergleiche 5.2.) stärker sein.

Die Stoßparameterabhängigkeit des Verhältnisses $w_{\text{exp}}^{\text{I}}/w_{\text{theor}}^{\text{I}}$ der experimentellen zu den theoretischen Werten für die Ionisationswahrscheinlichkeit der K-Schale von Kohlenstoff ist in Abbildung 37 aufgetragen. Im Sinne des Rückstoßeffekts liegen deutliche Abweichungen nur bei kleinen Stoßparametern vor. Aus Abbildung 37 läßt sich jedoch für festen Stoßparameter ein Trend zu größeren Abweichungen bei höheren Protonenenergien ablesen. Dies steht im Widerspruch zu der Abhängigkeit des Rückstoßeffekts von der Projektilenergie. Wir ziehen den Schluß, daß die in Abbildung 37 verdeutlichten Abweichungen der experimentellen von den theoretischen Werten nicht nur auf den Rückstoßeffekt zurückzuführen sind, sondern auch teilweise im Ionisationsmechanismus begründet sind.

7.2.3. Diskussion

Die Messungen an Kohlenstoff bringen gegenüber den Messungen an Aluminium eine Änderung in den charakterisierenden Parametern Z_1/Z_2 und V/v_K von $(Z_1/Z_2) = 0.077$ auf $(Z_1/Z_2) = 0.17$ und $(V/v_K) = 0.26$ auf $(V/v_K) = 0.62$. Es ist zu untersuchen, inwieweit davon die Qualität der Näherungen, die der bei Aluminium erfolgreichen theoretischen Interpretation zugrundeliegen, betroffen werden kann. Dabei ist es zu einfach, die Ursache für die zu kleinen theoretischen Ionisationswahrscheinlichkeiten in einem Zusammenbrechen der adiabatischen Näherung zu suchen. Im Adiabaskriterium $(V/v_K) \ll 1$ ist als charakteristische Elektronengeschwindigkeit v_K der Mittelwert aller Geschwindigkeiten des K-Schalenelektrons gesetzt. Unterscheiden wir

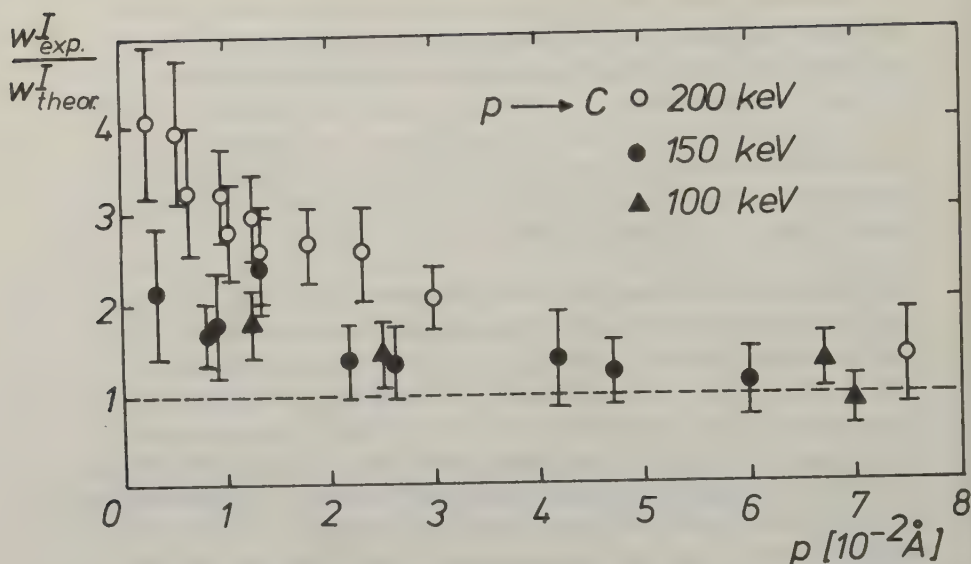


Abb. 37: Verhältnis der experimentellen zu den theoretischen K-Ionisationswahrscheinlichkeiten von Kohlenstoff als Funktion des Stoßparameters.

kleinere und größere Kernabstände als der K-Schalenradius, so sind diesen größere oder kleinere mittlere Elektronengeschwindigkeiten zuzuordnen. Für $(V/v_K \ll 1) \rightarrow (V/v_K \gg 1)$ sollte der Übergang von vollständiger Adjustierung der Wellenfunktion auf das Zwei-Zentren-Potential aus Targetkern und Projektil bis zur Einfrierung des ungestörten Elektronenzustandes nicht gleichmäßig über das ganze Atom erfolgen, sondern von großen Kernabständen zu kleinen fortschreiten. Da die Messungen bei Stoßparametern kleiner als der K-Schalenradius ($a_K \cong 9.3 \cdot 10^{-2} \text{Å}$) durchgeführt wurden und da insbesondere Abweichungen von den experimentellen Kurven vorwiegend bei Stoßparametern auftreten, die klein gegen a_K sind, erscheint es zulässig, die adiabatische Näherung beizubehalten.

Wir bleiben also im Bild der adiabatischen Näherung und betrachten als relevante Elektronenzustände die Molekülorbitale, die für jeden internuklearen Abstand R durch eine Schrödingergleichung

$$\hat{H}(R)\varphi(R) = \hbar\omega_n(R)\varphi(R)$$

beschrieben werden. $\hat{H}$ ist der Ein-Elektron-Hamiltonoperator für ein K-Schalenelektron im Feld des Targetkerns, des Protons und der übrigen Elektronen (siehe 7.1.3).

Die im vorhergehenden durchgeführte Berechnungsmethode für die Ionisationswahrscheinlichkeit soll anhand eines verbesserten Ansatzes für die semiklassische Näherung diskutiert werden. Dazu wird die Lösung der Schrödingergleichung

$$[\hat{H}(R(t)) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}]\psi(t) = 0$$

nicht wie bei der üblichen zeitabhängigen Störungsrechnung als Entwicklung nach Wellenfunktionen des ungestörten Hamiltonoperators $\hat{H}(\infty)$ angesetzt, sondern als Entwicklung nach den Eigenfunktionen des gestörten Hamiltonoperators $H(R(t))$:

$$\psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n(t) e^{-i \int_0^t dt' \omega_n(t')}$$

(Dieses Verfahren ist geläufig unter dem Begriff "perturbed stationary state method" und wird im weiteren mit PSS bezeichnet ^{/82/}). Der Ansatz führt in zur üblichen Störungsrechnung (im weiteren als USS-Rechnung bezeichnet) analoger Weise zu einer Amplitude erster Ordnung für den Übergang $i \rightarrow f$:

$$a_{fi}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' e^{i \int_{t'}^t dt'' \omega_{fi}(t'')} \langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi_i \rangle$$

Wegen der Hermitezität des Hamiltonoperators gilt dabei:

$$-\langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_i \rangle = \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \langle \varphi_f | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} | \varphi_i \rangle = \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \langle \varphi_f | \frac{\partial W}{\partial t} | \varphi_i \rangle.$$

$W(R(t))$ ist das zeitabhängige Störpotential des Projektils.

Die PSS-Übergangsamplitude berücksichtigt durch die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen φ_f , φ_i und der Übergangsfrequenz ω_{fi} dynamische Effekte, die in der USS-Rechnung entfallen.

Andersen und Mitarbeiter /19/ ziehen die Zeitabhängigkeit der Übergangsamplitude zur Deutung der Abweichungen ihrer experimentellen Ionisationswahrscheinlichkeiten von einem Z_1 -Skalengesetz heran, das auf Methoden beruht, wie sie im vorhergehenden auf die SCA-Beschreibung der Aluminium-K-Ionisation angewandt werden. Sie vernachlässigen dazu die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen. Die partielle Integration der PSS-Übergangsamplitude ergibt dann:

$$a_{fi} = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \varphi_f | W | \varphi_i \rangle e^{i \int_{-\infty}^t dt' \omega_{fi}(t')} \left(i + \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\omega_{fi}(t)} \right).$$

Gegenüber dem USS-Formalismus verbleibt hier ein additiver Term, der nach Abschätzungen von Andersen aber bevorzugt bei großen Stoßparametern wirksam wird.

Will man Effekte, die aus der Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen in der PSS-Übergangsamplitude entstehen qualitativ untersuchen, ist es nützlich, Polarkoordinaten R , $\hat{\theta}$ (in der Bahnebene des Projektils) einzuführen. Es ist dann:

$$\frac{\partial}{\partial t} | \varphi_i(t) \rangle = \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_i(t) \rangle + \dot{\hat{\theta}} \frac{\partial}{\partial \hat{\theta}} | \varphi_i(t) \rangle.$$

Die Winkelgeschwindigkeit des Projektils $\dot{\hat{\theta}}$ läßt sich umschreiben zu

$$\dot{\hat{\theta}} = - \frac{pV}{R^2}.$$

Für $\frac{\partial}{\partial \tilde{\theta}}$ kann der Operator $L_{\perp}$ der Drehimpulsprojektion auf die Drehachse der Projektilbahn eingeführt werden:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\theta}} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} L_{\perp}$$

Das Matrixelement $\langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} | \varphi_i \rangle$ spaltet damit auf in die nichtinterferierenden Terme

$$\dot{R} \langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_i \rangle \quad \text{und} \quad \frac{i}{\hbar} \frac{pV}{R^2} \langle \varphi_f | L_{\perp} | \varphi_i \rangle.$$

Der erste Term beschreibt eine Kopplung der Zustände i und f durch die Änderung des internuklearen Abstandes R , der zweite Term koppelt die Zustände durch Rotation der internuklearen Achse. Eine solche Darstellung ist natürlich nur dann sinnvoll, wenn φ_i von R und $\tilde{\theta}$ abhängt. Die Abhängigkeit in $\tilde{\theta}$ ergibt sich bei Verwendung echter Molekülorbitale für die Zustände i , die als polarisierte K-Schalen-Zustände des Targets vorstellbar sind. Die Polarisationsrichtung ist die internukleare Achse, deren Richtung gerade durch $\tilde{\theta}$ angegeben ist.

Da eine rasche Drehung der internuklearen Achse bevorzugt bei kleinen Stoßparametern auftritt, kommt der kinematische Effekt im Matrixelement der Rotationskopplung besonders bei kleinen Stoßparametern zur Geltung. Wegen der zunehmenden Polarisierung ist ferner eine Verstärkung im Sinne $(z_1/z_2) \rightarrow 1$ zu erwarten. Schließlich sollte der Effekt bei Erhöhung der Projektilgeschwindigkeit V zunehmen. Aus dieser Sicht ist es durchaus plausibel, daß eine PSS-Rechnung unter Verwendung molekularer Wellenfunktionen eine Stoßparameterverteilung der Ionisationswahrscheinlichkeit ergeben könnte, die bei kleinen Stoßparametern im Sinne der experimentellen Werte ansteigt.

Eine Polarisierung des Anfangszustandes kann auch für internukleare Abstände größer als der K-Schalenradius wirksam werden. Quantitative Hinweise dazu liefern Korrespondenzbetrachtungen für die Coulomb-Anregung in Form von Rechnungen zur Resonanzanregung eines harmonisch oszillierenden Elektrons durch das Coulomb-Feld einer mit konstanter Geschwindigkeit bewegten

Ladung ^{/83,84/}. Die Rechnungen wurden zur Deutung von Abweichungen im Energieverlust geladener Teilchen und Antiteilchen durchgeführt (Barkas-Effekt). Das einfache klassische Modell liefert neben einem Z_1^2 -abhängigen Term für den spezifischen Energieverlust auch einen additiven Z_1^3 -abhängigen Anteil, der das Vorzeichen der Projektilladung zur Geltung bringt. Für die semiklassische Näherung gilt für Projektilorte außerhalb des K-Schalenradius eine Analogie in der Form, daß dort eine Erhöhung der Ionisationswahrscheinlichkeit pro Wegelement der Projektilbahn gegenüber der unkorrigierten SCA-Rechnung zu erwarten ist. Ein solcher Effekt bevorzugt naturgemäß große Stoßparameter, wenn auch im Falle hoher V/v_K selbst bei kleinen Stoßparametern erhebliche Beiträge zur Ionisationswahrscheinlichkeit von Projektilorten außerhalb der K-Schale kommen (Abbildung 30). Die Übereinstimmung der experimentellen Ionisationswahrscheinlichkeit bei Stoßparametern nahe a_K mit der SCA/BEA-Kurve (Abbildung 37) zeigt jedoch, daß der Polarisierungseffekt hier (und damit im gesamten Stoßparameterbereich der Messungen) im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht zur Geltung kommt.

Als letzten Effekt der mit $(Z_1/Z_2) \rightarrow 1$ an Bedeutung gewinnen kann, soll der Ladungsaustausch ins Kontinuum des Projektils erwähnt werden, der einer Polarisation des Endzustandes f gleichkommt ^{/87/}. Experimentelle Evidenz erhält dieser Reaktionskanal durch die Beobachtung eines scharfen Peaks in Energiespektren der Elektronenemission in Vorwärtsrichtung, der gerade bei der Elektronengeschwindigkeit liegt, die mit der Projektilgeschwindigkeit übereinstimmt ^{/86/}. Doolen, McGuire und Mittlemann ^{/87/} schätzen den Einfluß des Ladungsaustauschs in Form einer Korrektur des integralen PWBA (- oder SCA)-Ionisationsquerschnitts ab:

$$\sigma_{korr.}^I = \sigma_{PWBA}^I \left[1 + \frac{Z_1}{Z_2} f(V/v_K) \right].$$

Der Zusatzterm wird aus dem Brinkmann-Kramers-Matrixelement für Ladungsaustausch ^{/85/} gewonnen. In dieser Näherung ist die

Stoßparameterabhängigkeit des Prozesses durch $(p/p_C)^2 K_2^2 (p/p_C)$ bestimmt. Der kritische Stoßparameter ist $p_C = \hbar v / (1/2 m v^2 + \varepsilon_K)$. Die Stoßparameterabhängigkeit des Termes, der den Ladungsaustausch beschreibt, weicht demnach nicht stark von der Stoßparameterverteilung der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit ab. In erster Näherung sollte die Berücksichtigung des Ladungsaustausches sich deshalb als Multiplikation der SCA-Ionisationswahrscheinlichkeit mit dem oben angegebenen Korrekturfaktor auswirken. Für Kohlenstoff und $(v/v_K) = 0.6$ läßt sich nach Doolen, McGuire und Mittleman etwa $(z_1/z_2) f(v/v_K) = 0.4$ ermitteln. Dieser Wert kann allerdings nur als Angabe der Größenordnung des Effekts gewertet werden. Dabei wird man aus zwei Gründen kleinere Korrekturfaktoren erwarten. Einmal ist der Interferenz der Kontinuumszustände des Projektils mit denen des Targets keine Rechnung getragen - dies wäre nur dann zulässig, wenn $\frac{1}{2} m_e v^2 \gg \langle E_f \rangle$ wäre, für 200 keV Protonen ist die mittlere Energie der in das Kontinuum des Targets emittierten Elektronen aber $\langle E_f \rangle = 150$ eV während $\frac{1}{2} m v^2 = 100$ eV beträgt. Zum anderen überschätzt der Brinkman-Kramers-Wirkungsquerschnitt im allgemeinen die experimentellen Werte ^{/87/}.

Es erscheint damit nicht möglich, die gefundene Zunahme der Ionisationswahrscheinlichkeit bei kleinen Stoßparametern durch einen Einfang von K-Elektronen in Kontinuumszustände des Projektils zu erklären.

8. Zusammenfassung

Anhand der koinzident gemessenen charakteristischen Röntgen-Emission wurde die durch Protonen im Energiebereich 100 keV bis 240 keV an Aluminium und Kohlenstoff induzierte Ionisation der K-Schale in ihrer Abhängigkeit vom Streuwinkel untersucht. Die im Koinzidenzexperiment erreichte Zeitauflösung war 8 ns.

Die Ergebnisse der differentiellen Messungen wurden in Form von Stoßparameterverteilungen der Ionisationswahrscheinlichkeit mit theoretischen Daten verglichen. Dazu wurden die Theorien der semiklassischen Näherung (SCA) und der klassischen Zweierstoß-Näherung (BEA) herangezogen. Die theoretischen Vergleichskurven wurden auf Grund von ab initio Rechnungen ohne Verwendung von Skalengesetzen erhalten.

Im Falle von Aluminium ergab sich dann befriedigende Übereinstimmung, wenn in der theoretischen Beschreibung der Ionisation eine adiabatische Anpassung der Wellenfunktion und Bindungsenergie der K-Schalenelektronen an das Coulomb-Feld des Protons berücksichtigt wird.

Eine Anwendung des gleichen Verfahrens ergab bei Kohlenstoff nur befriedigende Übereinstimmung bei Stoßparametern, die nicht sehr viel kleiner als der K-Schalenradius sind. Bei Stoßparametern sehr viel kleiner als der K-Schalenradius tritt eine drastische Überhöhung der experimentellen gegenüber den theoretischen Kurven auf. Diese Überhöhung kann teilweise als Stoßparameterabhängigkeit der gemessenen Fluoreszenzausbeute gedeutet werden. Als eine in den Rahmen des Ionisationsprozesses fallende Ursache wird die dynamische Kopplung von K-Zuständen und Kontinuumszuständen des Targets durch die Rotation des in engen Stößen formierten Quasimoleküls diskutiert.

9. Literaturverzeichnis

- /1/ W. Brandt, R. Laubert, Phys. Rev. Lett. 24, 19, 1037 (1970).
- /2/ W. Lichten, Phys. Rev. 164, 131 (1967).
- /3/ H. Bethe, Ann.d.Phys. 5, 325 (1930).
- /4/ N.F. Mott, Proc. Cambr.Phil.Soc.27, 553 (1931).
- /5/ W. Henneberg, ZS Physik 86, 592 (1933).
- /6/ E. Merzbacher, H.W. Lewis, Handbuch der Physik
(S. Flügge, Springer-Verlag, Berlin) 34 (1958).
- /7/ J. Bang, J.M. Hansteen, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 31,
No. 13 (1959).
- /8/ D.H. Madison, E. Merzbacher (1974) to be published in
Atomic Inner Shell Processes, B. Crasemann ed.,
Acad. Press.
- /9/ Q.C. Kessel, B. Fastrup, Case Studies in Atomic
Physics 3, 137 (1973).
- /10/ H.J. Stein, H.O. Lutz, P.H. Mokler, P. Armbruster,
Phys. Rev. A 5, 2126 (1972).
- /11/ S. Sackmann, H.O. Lutz, J. Briggs,
Phys. Rev. Lett. 32, 805 (1974).
- /12/ W. Brandt, R. Laubert, I. Sellin, Phys. Rev. 151,
56 (1966).
- /13/ G. Basbas, W. Brandt, R. Laubert, Phys. Rev. A 7,
983 (1973).
- /14/ E. Laegsgaard, J.U. Andersen, L.C. Feldman, Phys.
Rev. Lett. 29, 1206 (1972).
and in Inner Shell Ionization Phenomena,
R.W. Fink ed. (U.S. AEC, Oak Ridge), 1019 (1973).
- /15/ W. Brandt, K.W. Jones, H.W. Kraner, Phys. Rev. Lett.
30, 351 (1973).
- /16/ C.L. Cocke, R. Randall,
Phys. Rev. Lett. 30, 1016 (1973).

- /17/ R.R. Randall, J.A. Bečnar, B. Curnutte, C.L. Cocke,
Phys. Rev. A 13, 204 (1976).
- /18/ R. Schule, K.E. Stiebing, H. Zekl, H. Schmidt-Böcking,
I. Tserruya, K. Bethge, IV. Int. Conf. on the Physics
of Electronic and Atomic Collisions - Seattle (1975).
- /19/ J.U. Andersen, E. Laegsgaard, M. Lund, C.D. Moak, to be
published in Proc. Int. Conf. on Atomic Collisions
in Solids VI, Nucl. Instr. Meth. (1976).
- /20/ F. Bell, Anisotrope Röntgenausbeute in Einkristallen,
Habilitationsschrift, LMU München (1970).
- /21/ R.D. Edge, R. Sizmann, C. Varelas, Radiation Effects
22, 79 (1974).
- /22/ E.M. Bernstein, H.W. Lewis, Phys. Rev. 95, 83 (1954).
- /23/ C.W. Lewis, R.L. Watson, J.B. Natowitz, Phys. Rev. A 5,
1773 (1972).
- /24/ N. Stolterfoht, D. Schneider, K.G. Harrison, Phys.
Rev. A 8, 5, 2363 (1973).
- /25/ E.A. Milne, Phys. Rev. 93, 4, 762 (1954).
- /26/ G. Leibfried. Bestrahlungseffekte in Festkörpern,
B.G. Teubner, Stuttgart (1965).
- /27/ P. Gombás. Die statistische Theorie des Atoms,
Springer-Verlag, Wien (1949).
- /28/ G. Molière, Z. Naturforschung 2a, 142 (1947).
- /29/ C. Varelas, R. Sizmann, Radiation Effects 25, 3, 163 (1975).
- /30/ N. Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 33,
no. 8 (1948).
- /31/ G. Zintl, Dissertation, TU München (1971).
- /32/ H. Tittel, Diplomarbeit LMU München (1968).
- /33/ J.B. Marion, Rev. Mod. Phys. 33, 139 (1961).
- /34/ W. Wach, z. Veröffentl. im Jahresbericht 1975 d. Ges.
f. Strahlenforschung - Neuherberg.
- /35/ A.P. Lukirskii, M.A. Rumsh, J.A. Karpovich,
Optics and Spectroscopy 9, 343 (1960).

- /36/ H. Schmidt-Böcking, I. Tserruya, Z. Zekl, K. Bethge, Nucl.Instr. Meth. 120, 329 (1974).
- /37/ J.F. Gibbons, W.S. Johnson, S.W. Mylroie, Projected Range Statistics, Dowden, Hutchinson & Ross, Pennsylvania (1975).
- /38/ B.L. Henke, R.L. Elgin, R.E. Lent, R.B. Ledingham, Norelco Report XIV, No. 3-4, 112 (1967).
- /39/ T.A. Somer, P. W. Graves, IEEE Trans. Nucl. Science NS-16, No. 1, 376 (1969).
- /40/ R.K. Cacak, F.W. Martin, Phys. Rev. A 13, 2, 599 (1976).
- /41/ K. Feser, J. Müller, G. Wiech, A. Faessler, Journal de Phys., Coll. C 4, suppl. au no. 10, 331 (1971).
- /42/ K.G. Harrison, T. Tawara, F.J. De Heer, Physica 66, 16 (1973).
- /43/ J.M. Khan, D.L. Potter, R.D. Worley, Phys. Rev. 139, 6A, 1735 (1965).
- /44/ W.F. Van der Weg, W.H. Kool, H.E. Roosendaal, F.W. Saris, Rad. Effects 17, 245 (1973).
- /45/ H. Metzger, Diplomarbeit LMU München (1971).
- /46/ K. Feser, Phys. Rev. Lett. 28, No. 16, 1013 (1972).
- /47/ W. Hink, H. Paschke, Phys. Rev. A 4, 2 (1971).
- /48/ L.H. Toburen, Phys. Rev. A 5, No. 6, 2482 (1972).
- /49/ N. Stolterfoht, Physics Lett. 41 A, 5, 400 (1972).
- /50/ C.P. Bhalla, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 8, No. 17, 2792 (1975).
- /51/ L.H. Toburen, F.P. Larkins, Phys. Rev. A 6, 6, 2035 (1972).
- /52/ W. Hink, B. Krause, II. International Conf. on Inner Shell Ionization Phenomena, Freiburg (1976).
- /53/ R.A. Mattson, R.C. Ehlert, J. Chem. Phys. 48, 5465 (1968).
- /54/ K.A. Jamison, C.W. Woods, R.L. Kauffman, P. Richard, Phys. Rev. A 11, No. 2, 505 (1975).

- /55/ C.P. Bhalla, zitiert in Phys. Rev. A 13, No. 2, 572 (1976).
- /56/ A.A. Konstantinov, V.V. Perepelkin, T.E. Sazonova, Bull.Acad.Sci.USSR, Phys.Ser. 28, 103 (1964).
- /57/ L.E. Bailey, J.B. Swedlund, Phys. Rev. 158, 6 (1967).
- /58/ G. Basbas, Thesis, University of North Carolina (1968).
- /59/ G. Basbas, priv. Mitteilung.
- /60/ M. Gryziński, Phys. Rev. 107, 1471 (1957),
Phys. Rev. 115, 374 (1958),
Phys. Rev. 138, A 305 (1964).
- /61/ E. Gerjuoy, Phys. Rev. 148, 54 (1966).
- /62/ L. Vriens, Proc.Phys. Soc. Lond. 90, 935 (1966).
- /63/ J.S. Hansen, Phys. Rev. A 8, 822 (1973).
- /64/ J.H. McGuire, P. Richard, Phys. Rev. A 8, 1374 (1973).
- /65/ J.H. McGuire, Phys. Rev. A 9, 286 (1974).
- /66/ K. Alder, A. Winther, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid, Selsk. 29, no. 18 (1955).
- /67/ A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F.G. Tricomi, Higher transcendental functions, 2, p. 280, McGraw-Hill Book (1953).
- /68/ J.M. Hansteen, O.P. Mosebekk, Phys. Lett. 29A, 5 (1969), Z. Physik 234, 281 (1970).
- /69/ S. Hagström, S.E. Karlssen, Arkiv Fysik 26, 451 (1964).
- /70/ S. Hagström, Z. Physik 178, 82 (1964).
- /71/ J.M. Hansteen, O.M. Johnsen, L. Kocbach, Atomic Data and Nuclear Data Tables 15, 305 (1975).
- /72/ H.A. Bethe, R.W. Jackiw, Intermediate Quantum Mechanics, 2d ed. Benjamin, New York (1968).
- /73/ J.F. Reading, A.L. Ford, E. Fitchard, Phys. Rev. Lett. 36, 573 (1976)
- /74/ G. Basbas, W. Brandt, R.H. Ritchie, Phys. Rev. A 7, 1971 (1973).

- /75/ H. Panke, private Mitteilung.
J.P. Desclaux, Comp. Phys. Comm. 9, 31 (1975).
- /76/ J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley,
New York (1962).
- /77/ J.F. Chemin, S. Andriamonje, B. Saboya, J. Routurier,
J.P. Thibaud, to be published in Proc. Int. Conf.
on Atomic Collision in Solids VI, Nucl.Instr. Meth. (1976).
- /78/ K. Ishii, S. Morita, H. Tawara, Phys. Rev. A 13,
131 (1976)
- /79/ D. Burch, K. Taulbjerg, Phys. Rev. A 12, 508 (1975).
- /80/ E.J. McGuire, Phys. Rev. 185, 1 (1969).
- /81/ W.L. Fite, R.F. Stebbings, D.G. Hummer, R. T. Brack-
mann, Phys. Rev. 119, 663 (1960).
- /82/ N.F. Mott, H.S. Massey, The Theory of Atomic Collisions,
Clarendon Press, Oxford (1965).
- /83/ J.C. Ashley, R.H. Ritchie, W. Brandt, Phys. Rev. B 5,
2393 (1972).
- /84/ G. Basbas, W. Brandt, R. Laubert, Phys. Lett. 34A,
277 (1971).
- /85/ H.C. Brinkman, H.A. Kramers, Proc. Acad. Sci.
(Amsterdam) 33, 973 (1930).
- /86/ K. Dettman, K.G. Harrison, M.W. Lucas, J. Phys. B:
Atom. Molec. Phys. 7, 269 (1974).
- /87/ G.D. Doolen, J.H. McGuire, M.H. Mittleman,
Phys. Rev. A 7, 1800 (1973).

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr. R. Sizmann für die Förderung dieser Arbeit und die mir an seinem Institut gebotenen Möglichkeiten sowie Herrn Prof. Dr. F. Bell für zahlreiche Anregungen und klärende Gespräche.

Sehr wertvoll waren für mich Diskussionen mit Herrn Prof. J. Lindhard (Aarhus), Herrn Dr. P. Sigmund (Kopenhagen) und Herrn Dr. H.D. Carstanjen.

Allen Mitgliedern des Instituts und den Herren der Werkstatt danke ich für gute Zusammenarbeit.

Dem Bundesministerium für Wissenschaft und Forschung danke ich für finanzielle Unterstützung, dem Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften für die Möglichkeit zur Benutzung der Rechenanlage TR 440.

Lebenslauf

Geboren am 17.10.1938 in Leipzig. 1944 - 1949 Besuch der Volksschule in Lindau a.B.. Anschließend Besuch der Oberrealschule in Lindau a.B., 1959 Ablegung der Reifeprüfung. 1959 - 1960 Ableistung des Militärdienstes. Im Wintersemester 1960/61 Beginn des Studiums der Physik an der Universität München. Durchführung der Diplomarbeit bei Prof. R. Sizmann. 1967 Ablegung der Diplomprüfung. Seit 1968 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut von Prof. R. Sizmann. In der Folge Durchführung der Doktorarbeit und Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter an der Sektion Physik der Universität München.

